

Auger – Elektronen – Emission
induziert durch gittergeführte Protonen
und ihre Anwendung zur Oberflächenanalyse

Manfred Schuster



Digitized by the Internet Archive
in 2026

Auger – Elektronen – Emission
induziert durch gittergeführte Protonen
und ihre Anwendung zur Oberflächenanalyse

Dissertation
der Fakultät für Physik
der Ludwig – Maximilians – Universität München

vorgelegt von
Manfred Schuster
aus München

München, den 09.10.85

1. Gutachter: Prof. Dr. R. Sizmann

2. Gutachter: Prof. Dr. G. Ertl

Tag der mündlichen Prüfung: 18.02.86

Inhaltsverzeichnis

1. Zusammenfassung.....	6
2. Einleitung.....	8
3. Experimentelles.....	11
3.1. Probenpräparation.....	11
3.2. Streukammer.....	16
3.3. Elektronenenergieanalysator.....	22
3.4. Empfindlichkeit.....	28
3.5. Elektronik.....	29
4. Physikalische Grundlagen.....	31
4.1. Oberflächen-Ionengitterführung.....	31
4.2. Ionisation.....	37
4.2.1. Coulombionisation.....	38
4.2.2. Ionisation durch Sekundärprodukte.....	45
4.2.2.1. Schnelle Rückstoßatome.....	45
4.2.2.2. Sekundärelektronen.....	47
4.2.2.3. Photonen.....	55
4.2.3. Energetische Verschiebung von Löchern.....	56
4.3. Auger-Prozeß.....	57
4.4. Auger-Ausbeute und Fluoreszenzausbeute.....	60
4.5. Elektronentransport.....	61
4.6. Konzept zur analytischen Berechnung der Auger-Elektronenausbeuteprofile.....	63
4.6.1. Ausbeuteprofile bei starrem Gitter.....	63
4.6.2. Ausbeuteprofile bei thermischen Gitterschwingungen.....	65
4.7. Arbeitsparameter für die Auger-Elektronenemission bei Oberflächen-Ionengitterführung.....	66
4.7.1. Neutralisation.....	66
4.7.2. Adiabatische Länge und kritischer Gitterführungsabstand.....	67
4.7.3. Ionisation durch Sekundärelektronen.....	70

4.7.4.	Wirkungsquerschnitt der direkten Coulombionisation, Auger-Ausbeute.....	73
4.7.5.	Mittlere Austrittslänge der Elektronen.....	74
4.7.6.	Festlegung der experimentellen Rahmen- bedingungen.....	74
4.7.7.	Einschußwinkel.....	77
5.	Grundlagen der Computersimulationen.....	78
5.1.	Gliederung und Aufbau der Simulationsprogramme.....	78
5.2.	Streuung der Projektile an Targetatomen	84
5.2.1.	Binärer Stoß.....	85
5.2.2.	Impulsnäherung, Streuformel.....	88
5.2.3.	Anziehung durch Bildladung.....	91
5.3.	Thermische Gitterschwingungen.....	93
5.4.	Energieverlust der Protonen.....	96
5.5.	Ionisationswahrscheinlichkeit.....	98
5.6.	Oberflächenstufen.....	99
5.7.	Erfassung und Normierung der Flußdichteverteilung.....	101
5.8.	Testmöglichkeiten des Computerprogramms.....	104
6.	Ergebnisse aus Ionenstreuexperimenten und Computersimulationen.....	105
6.1.	Spektren ioneninduzierter Auger-Elektronen.....	105
6.2.	Bedeckungsmessung mit ioneninduzierter Auger-Elektronenspektroskopie zur Untersuchung des Ionisationsprozesses.....	107
6.3.	Einfluß des Einschußwinkels ϕ auf die Auger-Elektronenausbeute.....	110
6.4.	Vergleich von axialer und planarer Gitterführung an der Oberfläche.....	113
6.4.1.	Axiale Oberflächen-Ionengitterführung.....	116
6.4.2.	Planare Ionengitterführung.....	127
6.5.	Einflüsse auf die Ausbeuteprofile.....	135
6.5.1.	Abschneidestoßparameter.....	135
6.5.2.	Thermische Gitterschwingungen.....	138
6.5.3.	Mittlere Austrittslänge der Elektronen.....	143
6.5.3.1.	Axiale Oberflächen-Ionengitterführung..	143
6.5.3.2.	Planare Ionengitterführung.....	146

6.5.4. Oberflächenstufen.....	149
6.5.5. Stoßparameterabhängigkeit des Energieverlustes..	152
6.6. Einfluß der Bedeckung bei axialer und planarer Ionengetterführung.....	154
6.7. Strahlenschäden.....	157
6.8. Fehler der Simulationsergebnisse.....	161
7. Strukturbestimmung der sauberen Oberfläche Ni(110)-(1x1) sowie der sauerstoffbedeckten Oberfläche O/Ni(110)-(2x1)....	164
7.1. Bisherige Untersuchungen am Adsorbatsystem Sauerstoff auf Ni(110).....	164
7.1.1. Klassifizierung der Ni(110)-Strukturen bei verschiedenen Sauerstoffbedeckungen.....	164
7.1.2. O/Ni(110)-(2x1)-Oberfläche.....	165
7.2. Strukturbestimmung des Nickelsubstrats an der sauberen und der sauerstoffbedeckten (110)-Oberfläche.....	167
7.2.1. $[1\bar{1}0]$ -Einschußrichtung.....	169
7.2.2. $[001]$ -Einschußrichtung.....	175
7.3. Positionsbestimmung der adsorbierten Sauerstoffatome...	182
7.3.1. $[001]$ -Einschußrichtung.....	178
7.3.2. $[1\bar{1}0]$ -Einschußrichtung.....	183
7.3.3. Bestimmung des Abstandes Sauerstoffatom - Nickelatomkette.....	184
7.4. Ergebnisse der Oberflächen-Strukturanalyse.....	185
8. Computerprogramm.....	187
8.1. Struktogramm.....	188
8.2. Programm NI001 mit Subroutine GRACHA und GRAFLU.....	189
9. Literaturverzeichnis.....	219
Danksagung.....	226
Lebenslauf.....	227

1. Zusammenfassung

Saubere sowie sauerstoffbedeckte Ni(110)-Oberflächen wurden streifend mit 150keV-Protonen beschossen und dadurch zur Emission von Auger-Elektronen angeregt. Diese protoneninduzierten Auger-Elektronen wurden nach ihrer Energie analysiert, und die Stärke einzelner Auger-Linien in Abhängigkeit von der Einschubrichtung des Protonenstrahls gemessen. Durch die Spektroskopie protoneninduzierter Auger-Elektronen konnten an der Substratoberfläche Fremdatome in geringen Spuren identifiziert werden. Es war zum Beispiel möglich, 0,05 Monolagen von adsorbiertem Sauerstoff nachzuweisen. Bei der Untersuchung der Abhängigkeit der Auger-Linien vom Einschubwinkel zeigte sich eine starke Abnahme der Auger-Elektronenausbeute beim Einschub längs niederindizierter Richtungen, wenn die Protonen von den Atomketten oder Atomenebenen geführt werden. Liegen die Ausbeuteprofile für verschiedene Einschubrichtungen vor, so kann man daraus unmittelbar eine Aussage über die Struktur der Oberfläche gewinnen. Eine erste Beurteilung der Substratstruktur ermöglicht eine Formel von Lindhard, die eine theoretische Beziehung zwischen der Halbwertsbreite des Ausbeuteprofiles und dem Abstand der Atome in den Ketten herstellt. Zur Lokalisierung adsorbierter Atome bedient man sich, in einer Art Triangulation, der inhomogenen Flußdichteverteilung der geführten Projektile. Genauere Aussagen liefert der Vergleich der gemessenen Profile mit den Ergebnissen von Computersimulationen. Mit Hilfe eines dafür entwickelten Computerprogramms wurden erstmals die Ausbeuteprofile von Auger-Elektronen bei Ionengitterführung im oberflächennahen Bereich berechnet.

Diese neue experimentelle Methode zur Oberflächen-Strukturanalyse - ioneninduzierte Auger-Elektronenspektroskopie in Verbindung mit Oberflächen-Ionengitterführung - wurde exemplarisch auf die saubere Ni(110)-(1x1)-Oberfläche und auf die mit 0,4 bis 0,5 Monolagen Sauerstoff bedeckte Oberfläche O/Ni(110)-(2x1)

angewandt. Dabei wurde ein neues Strukturmodell der sauerstoffbedeckten O/Ni(110)-(2x1)-Oberfläche gefunden: das Sägezahnmodell. Die Ni(110)-Oberfläche ist in der (2x1)-Struktur rekonstruiert, wobei sich jede zweite [001]-Nickelatomkette der Oberfläche seitlich nach oben in die Position der nächsthöheren Kette verschiebt, so daß eine asymmetrische Sägezahnanordnung der Atome entsteht. Die adsorbierten Sauerstoffatome befinden sich in der langen Brückenposition $25 \pm 12,5 \text{ pm}$ oberhalb der obersten [001]-Nickelatomketten der rekonstruierten Oberfläche.

In Computersimulationen und Experimenten wurde die Abhängigkeit der Ausbeuteprofile von folgenden Parametern untersucht:

- Einschubwinkel des Protonenstrahls zur Kristalloberfläche
- Ionisationswahrscheinlichkeitsfunktion
- mittlere Austrittslänge der Auger-Elektronen
- thermische Gitterschwingungen
- Energieverlust der Protonen
- Stufen in der Kristalloberfläche.

Die axiale Oberflächen-Ionengitterführung (Einschubwinkel der 150keV-Protonen zur Nickelkristalloberfläche ca. 1°) erwies sich in der Verbindung mit der Spektroskopie ioneninduzierter Auger-Elektronen als oberflächensensitive Methode. Neben der selektiven Anregung der obersten Atomlagen durch die geführten Ionen trägt zur Oberflächen sensitivität noch die kurze Austrittslänge der Auger-Elektronen bei. Deutliche Ausbeuteminima erhält man, wenn die adiabatische Länge für die Ionisation des betreffenden Atomorbitals kleiner ist als der kritische Gitterführungsabstand. Außerdem müssen sekundäre Ionisationsprozesse vernachlässigbar sein gegenüber der Coulombionisation durch das Ion selbst. Der Einfluß der thermischen Gitterschwingungen und des Energieverlustes des Projektils auf die Ausbeuteprofile ist gering. Die in einem Auswahl diagramm zusammengefaßten Versuchsparameter zeigen, daß für beliebige Kombinationen von Substrat und Adsorbat, mit Ausnahme von Wasserstoff, Helium, Lithium und Beryllium, immer geeignete Bedingungen realisierbar sind, die es erlauben, die vorgestellte Methode der Oberflächen-Strukturanalyse anzuwenden.

2. Einleitung

Aufbau und Eigenschaften der Materie beschäftigen Physik und Chemie gleichermaßen. Mit den einfachen Modellen des idealen Gases und des idealen Festkörpers können bereits viele Eigenschaften verstanden werden. Der ideale Festkörper besteht aus identischen Atomen, die streng periodisch in einem unendlich ausgedehnten dreidimensionalen Gitter angeordnet sind. Alle realen Festkörper sind jedoch von begrenzter Ausdehnung. Deshalb spielt die Oberfläche eine eigene Rolle, die zum Beispiel in der heterogenen Katalyse, der Halbleitertechnologie und der Korrosion von großer praktischer Bedeutung ist.

Analog zum idealen Festkörper könnte man eine ideale Oberfläche als Begrenzungsfläche eines Festkörper-Halbraums gegenüber dem Vakuum definieren, in der die Atome lateral wie auch senkrecht zur Begrenzungsfläche ebenso angeordnet sind wie im Kristallinneren. Mit einem Modell dieser Art lassen sich jedoch die realen Oberflächen kaum beschreiben. Die ungesättigten Bindungen an der Begrenzungsfläche führen in vielen Fällen zu Atomanordnungen, die von der Struktur der idealen Oberfläche abweichen. Setzt man diese Festkörperoberfläche einer Gasatmosphäre aus, so werden an der Oberfläche Gasatome adsorbiert und häufig treten mit der Adsorbatbedeckung Umstrukturierungen der Substratoberfläche auf. Struktur und Eigenschaften der realen Oberfläche müssen daher zunächst durch Oberflächen-Analysemethoden experimentell bestimmt werden. Die Art der Atome und ihre geometrische Position ist wichtig für die chemischen Prozesse an der Oberfläche und für die elektronischen Eigenschaften. Auch zur selbstkonsistenten Berechnung der Bandstruktur und der Zustandsdichte an Oberflächen braucht man als Ausgangspunkt die Anordnung der Atome an der Oberfläche.

Häufig wird die Methode der Beugung niederenergetischer Elektronen (Low Energy Electron Diffraction - LEED) zur Bestimmung der Oberflächenstruktur eingesetzt. In LEED-Unter-

suchungen gibt das Beugungsbild der elastisch rückgestreuten Elektronen Auskunft über die Symmetrie der Oberflächenatome. Eine periodische Atomanordnung ist dazu Voraussetzung. Zum Beugungsbild tragen alle Atome der Oberfläche bei. Weitere Information erhält man aus der Intensitätsverteilung der inelastisch rückgestreuten Elektronen. Die Interpretation dieser Ergebnisse ist jedoch derart kompliziert, daß sich selbst mit aufwendigen dynamischen LEED-Rechnungen oft keine eindeutigen Aussagen über die Position der Substrat- und Adsorbatatome gewinnen lassen. Statt der Beugung von Elektronen wird neuerdings auch die Beugung von Atomstrahlen benutzt, um die atomare Welligkeit (Korrugation) der Oberfläche abzubilden. Eine andere Gruppe von Oberflächen-Strukturanalyse-Methoden bedient sich der Streuung von Ionen an Oberflächen (Low Energy Ion Scattering - LEIS oder Medium Energy Ion Scattering - MEIS). Hiermit ist eine Strukturanalyse und eine Identifizierung adsorbierter Atome im Prinzip möglich, jedoch begrenzt die Energieauflösung gestreuter Ionen insbesondere bei leichten Ionen die Identifizierung der Targetatome (Substrat- und Adsorbatatome). Darüberhinaus besitzen Targetatome mit niedriger Kernladungszahl einen geringen Rückstreuwirkungsquerschnitt. Bei kleinen Projektilenergien stört zusätzlich die Mehrfachstreuung und die Neutralisation. Die Elektronen-Energieverlust-Spektroskopie (Electron Energy Loss Spectroscopy - EELS) gibt Auskunft über die Bindungsverhältnisse zwischen Adsorbatatomen und Substratatomen. Als ideales Instrument der Oberflächenanalyse wird zur Zeit die Raster-Tunnelelektronen-Mikroskopie (Scanning Tunneling Microscopy - STM) angesehen, da sie ein direktes Bild der Oberfläche im Ortsraum liefert. Eine Periodizität in der Atomanordnung ist hierbei nicht erforderlich. Um im Bild einzelne Atome separieren zu können, ist allerdings eine Steigerung der Auflösung um den Faktor 2 bis 4 erforderlich.

Trotz der Fülle möglicher Oberflächen-Analysemethoden läßt jedes Verfahren Wünsche offen. Ziel dieser Arbeit ist es, eine neuartige Methode zur Oberflächenanalyse zu erschließen. Dazu

werden die Möglichkeiten der Ioneninduzierten Auger-Elektronenspektroskopie in Verbindung mit Oberflächen-Ionengitterführung zur Strukturbestimmung einkristalliner Oberflächen untersucht. Diese Kombination öffnet der Auger-Elektronenspektroskopie ein neues Anwendungsfeld in der Strukturanalyse, das der konventionellen elektroneninduzierten Auger-Elektronenspektroskopie unzugänglich blieb. Die neue Methode wird exemplarisch auf die Untersuchung einer sauberen und einer sauerstoffbedeckten Nickel-(110)-Oberfläche angewandt.

3. Experimentelles

3.1. Probenpräparation

In den hier vorgestellten Experimenten zur Ionengitterführung wird als Target ein Nickel-(110)-Einkristall verwendet. Metals Research Ltd. liefert solche Kristalle in Stabform von 15mm Durchmesser und 30mm Länge vororientiert auf 3° . Dieser Nickelkristall besitzt eine Reinheit von 99,999% (5N). Für die Messungen benötigt man einen scheibenförmigen Kristall von 4mm Dicke, den man mit einer Wolframdrahtsäge vom Kristallstab abschneidet. Nach dem Abätzen der amorphen Schichten an der Schnittfläche mit Hilfe von Königswasser wird der Kristall auf einem Röntgendiffraktometer in [110]-Richtung orientiert. Man kann damit die Verkippung der [110]-Gitterrichtung zur Achse der Bearbeitungsvorrichtung auf $0,01^\circ$ reduzieren. Die anfänglich noch schiefen und unebenen Schnittflächen werden auf einer Schleifmaschine mit Schleifpapier der Körnung $70\mu\text{m}$, $48\mu\text{m}$ und $32\mu\text{m}$ geschliffen. Anschließend wird die Oberfläche mit Diamantpaste von $7\mu\text{m}$ und $1\mu\text{m}$ Körnung poliert. Die Bearbeitungsvorrichtung erlaubt es, all diese Arbeitsgänge in der Kristallpositionierung durchzuführen, die durch die Orientierung im Diffraktometer festgelegt worden ist. Damit ist gewährleistet, daß die Verkippung der präparierten Oberfläche zur (110)-Gitterebene möglichst klein bleibt. Beim mechanischen Polieren mit feinkörnigem Schleifmaterial ($<10\mu\text{m}$) wird die Kristalloberfläche bis zu einer Tiefe von der Größe des Schleifkorns amorphisiert, auch wenn die Rauhtiefe wesentlich geringer ist [1]. Diese amorphe Schicht trägt man durch elektrochemisches Polieren ab, indem man den Kristall in einem Elektrolyten aus Phosphorsäure, Schwefelsäure und Glyzerin auf positives Potential legt und 20 Minuten lang einen Strom mit der Stromdichte $0,1\text{A}/\text{cm}^2$ fließen läßt [2]. In diesem Stadium der Oberflächenpräparation wird das elektrochemische Polieren dem Abätzen vorgezogen, da es in

geringerem Maße zu Ätzgruben führt. Zur Kontrolle wurde die Orientierung des fertig präparierten Kristalls nochmals im Röntgendiffraktometer überprüft. Dabei ergab sich eine Verkipfung der mittleren geometrischen Oberfläche zur (110)-Gitterebene von weniger als $0,02^\circ$. Anhand einer Laue-Aufnahme wird die Lage der [001]- und $[\bar{1}\bar{1}0]$ -Richtung in der (110)-Oberfläche bestimmt und markiert.

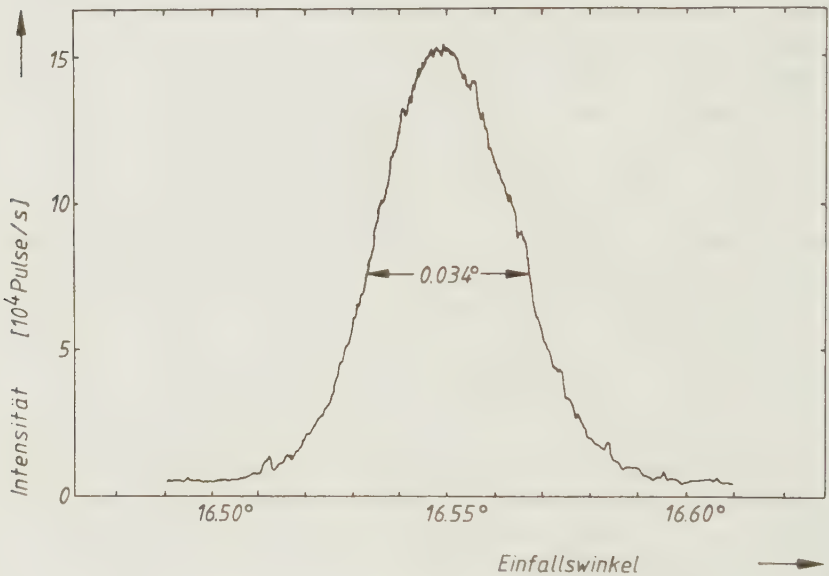


Abb. 3.1: Rockingkurve des Nickel-Einkristalls gemessen anhand des (220)-Mo-K α_1 -Reflexes.

Abweichungen der Kristallstruktur vom idealen Gitter, insbesondere an der Oberfläche, beeinträchtigen die Ionengitterführung und die Adsorption. Diese Gitterdefekte sind zum Teil Kleinwinkelverkipnungen einzelner Bereiche des Gitters zueinander (Mosaikverkipnungen) oder Störungen, die von Korngrenzen ausgehen. Auch für die Oberfläche sind Defekte im Kristallinneren von Einfluß, da sie Keime sind für Defekte, die sich

beim Tempern bis zur Oberfläche ausbreiten. Die Stärke der Mosaikverkipungen läßt sich mit der Röntgendiffraktometer-technik bestimmen [3]. Zu diesem Zweck untersucht man die Form und die Breite der Intensitätsverteilung eines Braggreflexes. Bei feststehender Röntgenquelle und festem Detektor mit großer Eintrittsblende dreht man den Kristall, so daß nacheinander alle Mosaikblöckchen in Reflexionsstellung kommen, während man die Intensität mißt. Diese sog. Rockingkurve gibt Aufschluß über die Verteilung der Mosaikverkipungen (Abb. 3.1). Mit den verwendeten Blendenöffnungen errechnet sich eine Mosaikverkipung von $0,025^\circ$ [4].

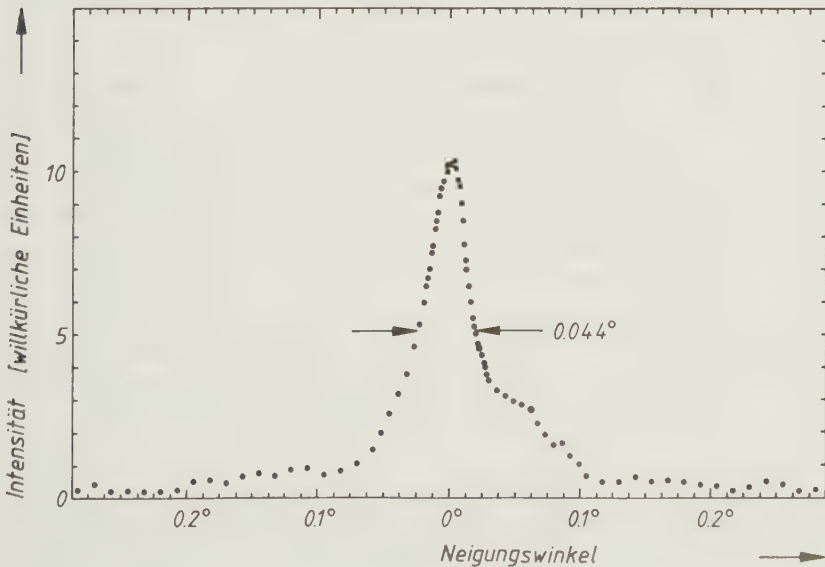


Abb. 3.2: Verteilung der Neigungswinkel im Relief der Kristalloberfläche.

Darüberhinaus verursacht auch die Präparation der Oberfläche selbst Störungen, die verhindern, daß die präparierte Oberfläche atomar eben wird. Das elektrochemische Abtragen amorpher Schichten liefert zwar eine einkristalline spiegelnde Oberfläche, gleichzeitig wird aber eine noch mit freiem Auge sichtbare Welligkeit dieser Oberfläche (Orangenstruktur) hervorgerufen. Diese Welligkeit läßt sich an der Aufweitung eines Laserstrahls beobachten, der von der Kristalloberfläche reflektiert wird. Ähnlich der Intensitätsverteilung des Braggreflexes mißt man hier die Intensitätsverteilung des reflektierten Laserstrahls in Abhängigkeit vom Streuwinkel (siehe Abb. 3.2). Die Halbwertsbreite der Verteilung der Verkippenungen zur gemittelten Oberfläche beträgt $0,04^\circ$. Die größten noch beobachteten Verkippenungswinkel sind $0,75^\circ$.

Nach diesen Vorbereitungen wird der Kristall am Manipulator befestigt und in den Rezipienten (vgl. Abschnitt 3.2) eingebaut. Da selbst nach dem Evakuieren des Rezipienten die Kristalloberfläche mit Adsorbaten noch stark kontaminiert ist, muß die Kristalloberfläche durch zyklisches Ionenzerstäuben und Tempern in situ gereinigt werden. Dazu beschießt man die Kristalloberfläche jeweils ca. 5 Minuten lang mit $1,8\text{keV-Ne}^+$ -Ionen bei einer Stromdichte von 5mA/cm^2 und zerstäubt damit die Verunreinigungen an der Oberfläche. Danach wird der Kristall für ca. 5 Minuten bei 1300K getempert, einer Temperatur, bei der die durch Ionenzerstäubung entstandenen Gitterdefekte ausheilen (Schmelztemperatur 1726K). Gleichzeitig diffundieren aber auch Verunreinigungen (z.B. Schwefel) aus dem Kristallinneren an die Oberfläche, bis sich ein Gleichgewicht einstellt. Wiederholtes Ionenzerstäuben und Tempern (ca. 50 bis 100 mal) führt zur Verarmung des Kristalls an Verunreinigungen. Beim letzten Ausheilzyklus wird die Temperatur auf 1000K begrenzt, was zur Rekristallisation der Oberfläche ausreicht, aber nicht zur Segregation weiterer Verunreinigungen. Vor jeder Messung werden die Reinigungszyklen sooft wiederholt, bis mit Auger-Elektronenspektroskopie keine Verunreinigungen mehr nachweisbar sind (vgl. Abb. 3.3). Diese Überprüfung kann man im Prinzip

sowohl an elektroneninduzierten als auch an Ioneninduzierten Auger-Elektronenspektren vornehmen. Bei Spektroskopie Ionen-induzierter Auger-Elektronen treten jedoch Schwierigkeiten auf durch die starken Intensitätsschwankungen im Elektronenuntergrund (vgl. Abschnitt 4.2.2.2 und 6.1) und durch die drastische Abnahme des Ionisationswirkungsquerschnitts bei höheren Elektronenbindungsenergien (vgl. Abschnitt 4.2.1 und 6.1). Dies erfordert eine Anpassung von Verstärkung und Offset, so daß man das Spektrum nur abschnittsweise aufnehmen kann.

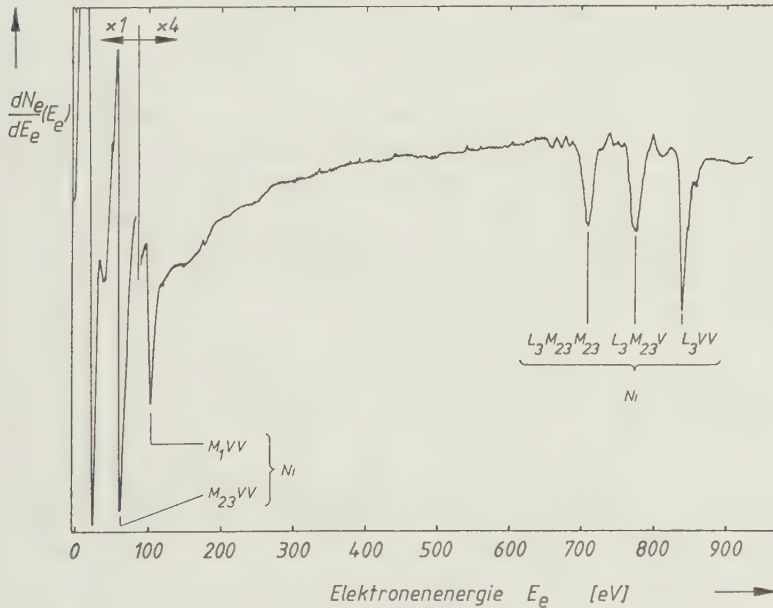


Abb. 3.3: Auger-Elektronenspektrum (elektroneninduziert) einer gereinigten Ni(110)-Oberfläche.

Die Einkristallinität der obersten Atomlagen zeigt sich in charakteristischen Blocking-Mustern, die bei völlig abgedunkeltem Labor im Schauglas gegenüber dem Strahleintritt sichtbar werden, wenn der Ionenstrahl die Kristalloberfläche streift [4]. Als Komplementäreffekt zur Ionengitterführung resultiert das

Blocking daher, daß Projektile, die von einem Gitterplatz ausgehen, davon abgehalten werden, sich entlang der Atomketten oder Atomebenen fortzubewegen [5]. Ursprünglich im Primärstrahl einfallende Projektile können in einem Stoß mit kleinem Stoßparameter (Großwinkel-Rutherford-Streuung) so gestreut werden, als würden sie gleichsam von einem Gitterplatz starten [6]. Weitere Streuprozesse im Kristall bewirken eine Intensitätsverteilung im Blocking-Muster, die von der Gitterstruktur bestimmt wird. Bei einer amorphen Oberfläche verschwinden solche Blocking-Effekte und man beobachtet nur diffuse Streubilder.

In getrennten Voruntersuchungen wurde die Oberflächenstruktur auch mit der Methode der Beugung langsamer Elektronen (Low Energy Elektron Diffraction - LEED) untersucht. Dabei zeigte sich, daß die oben beschriebenen Zyklen aus Ionenzerstäubung und Tempern reproduzierbar ein (1x1)-LEED-Muster liefern. Dieses LEED-Muster bestätigt, daß eine unrekonstruierte Oberfläche vorliegt, wie man es bei der sauberen und unbedeckten Ni(110)-Oberfläche erwartet (vgl. Abschnitt 7.1).

3.2. Streukammer

Alle Oberflächenuntersuchungen an der Ni(110)-Oberfläche werden in einem ausheizbaren UHV-Rezipienten (UHV - Ultrahochvakuum) durchgeführt, der auch als Streukammer für die Experimente zur Ionengitterführung dient. Mit einem leistungsfähigen Pumpsystem, bestehend aus einer Turbomolekularpumpe von $200\text{dm}^3/\text{s}$, einer Ionengetterpumpe von $350\text{dm}^3/\text{s}$ und einer Titansublimationspumpe von bis zu $4000\text{dm}^3/\text{s}$ Saugvermögen, erreicht man in Verbindung mit einem Kühlschild einen Restgasdruck von unter 10^{-8}Pa (10^{-10}mbar). Voraussetzung ist, daß man den Rezipienten vorher bei einer Temperatur von 250°C ausgeheizt hat. Die Analyse des Restgases weist hauptsächlich H_2 , H_2O , N_2 , CO und CO_2 aus. Bei einem Druck von 10^{-8}Pa wird eine saubere Oberfläche innerhalb von 20 Minuten mit 0,1 Monolagen Restgas-

atome bedeckt (vgl. Abschnitt 6.2).

Den Totaldruck mißt man mit Bayard-Alpert-Meßröhren mit einer Genauigkeit von etwa $\pm 30\%$. Die Partialdrücke der einzelnen Restgaskomponenten lassen sich mit einem Quadrupolmassenspektrometer ermitteln. An der Streukammer sitzen außerdem Feindosierventile für den Einlaß von Sauerstoff zur Bedeckung und für den Einlaß von Neon zum Ionenzerstäuben.

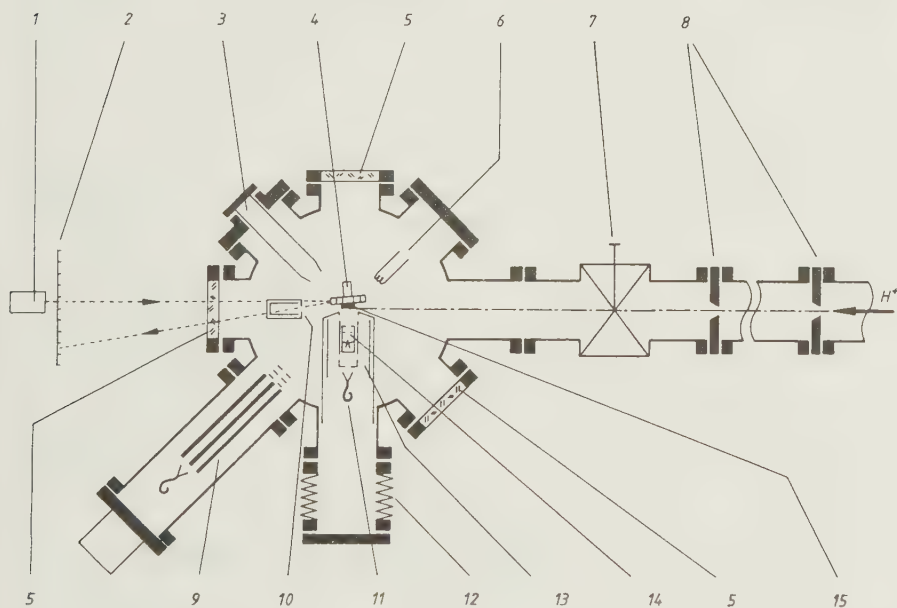


Abb. 3.4: Streukammer mit Instrumentierung im Schnitt (Analyseerebene). (1) Justierlaser, (2) Skala zum Ablesen der Winkeleinstellungen, (3) Ionenzerstäubungskanone, (4) Probenhalterung des Manipulators, (5) Schauglas, (6) Glühkathode für Elektronenstoßheizung, (7) Plattenventil, (8) Strahlblenden im Strahlrohr, (9) Quadrupolmassenspektrometer, (10) Faradaybecher, (11) Elektronenvervielfacherkanal, (12) Verschiebevorrichtung für CMA, (13) Auger-Elektronenspektrometer (CMA), (14) integrale Elektronenkanone, (15) Ni(110)-Kristall.

Der zylindrische Rezipient wird oben mit einem abnehmbaren Deckel verschlossen. In der Mitte des Deckels ist ein Manipulator angeflanscht. Er ermöglicht Translationen und Rotationen der Probe in den drei Raumrichtungen x , y , z bzw. um die Winkel ϕ und θ . Ebenfalls am Deckel angebracht ist ein verschiebbarer Faraday-Becher mit einer Eintrittsöffnung von 4mm Durchmesser zur Messung des Strahlstroms I_1 (vgl. Abb. 3.4). Eine Glühwendel auf erdnahem Potential dient als Kathode für eine Elektronenstoßheizung zum Tempern des Kristalls. Dazu legt man den Kristall allein auf positive Hochspannung von 5kV und kann dann bei einer Heizleistung von ca. 80W rasch Kristalltemperaturen bis zu 1500K erreichen.

Am Umfang des zylindrischen Rezipienten befinden sich in einer Ebene, der sog. Analysierebene, acht NW100-Flansche. Diese Flansche tragen das Quadrupolmassenspektrometer, die Ionenzerstäubungskanone (Sputter Gun) und einen radial verfahrbaren Elektronenenergieanalysator (Cylindrical Mirror Analyzer - CMA) (siehe Abb. 3.4). Über ein differentiell gepumptes Strahlrohr ist der UHV-Rezipient mit dem Ionenbeschleuniger gekoppelt. Ein massenselektierter monoenergetischer Protonenstrahl mit einer Energie von $E_1^{(0)} = 150\text{keV}$ und einer typischen Strahlstromdichte von 100nA/mm^2 wird in die Streukammer geführt. Dabei begrenzen Blenden im Strahlrohr den Ionenstrahl auf einen Durchmesser von 2mm und eine maximale Divergenz von $0,13^\circ$.

Streifend unter dem Winkel ϕ trifft der Ionenstrahl auf die (110)-Oberfläche des Nickelkristalls. In Abb. 3.5 ist der Ioneneinfall auf die Nickelprobe, der Austritt der durch Ionenbeschuß freigesetzten Elektronen und die Bestimmung ihrer Energie schematisch dargestellt. Um für die Einschubwinkel ϕ und θ die richtigen Bezugspunkte zu haben, wird der Kristall in mehreren Schritten ausgerichtet. Die Justierungen der Probenhalterung vor dem Schließen des Vakuumrezipienten sind im Detail in Ref. [4] beschrieben. Das Ziel dieser Einstellungen ist es, den Kristall so zu positionieren, daß die Drehachse der Erstrotation um den Winkel ϕ durch die Oberfläche des Kristalls verläuft. Die Achse der Zweitrotation θ steht senkrecht auf der

Achse der Erstrotation. Darüberhinaus wird der Kristall zur Achse der Zweitrotation zentriert und so justiert, daß die Normale der (110)-Oberfläche mit der Zweitrotationsachse zusammenfällt. Die Achse der Erstrotation läßt sich durch Kippung der Manipulatorkalotte senkrecht zur sog. Analysierebene einrichten. Die Analysierebene wird durch den einfallenden Ionenstrahl und die Achse des Auger-Elektronenspektrometers aufgespannt. Auch im eingebauten Zustand sind mit Hilfe des

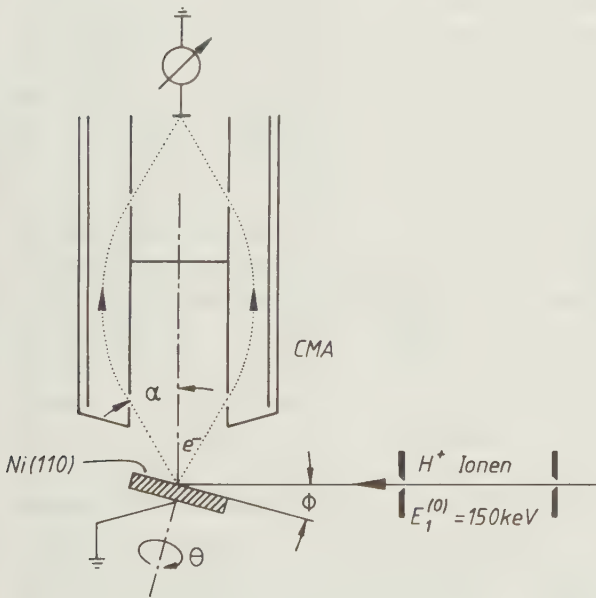
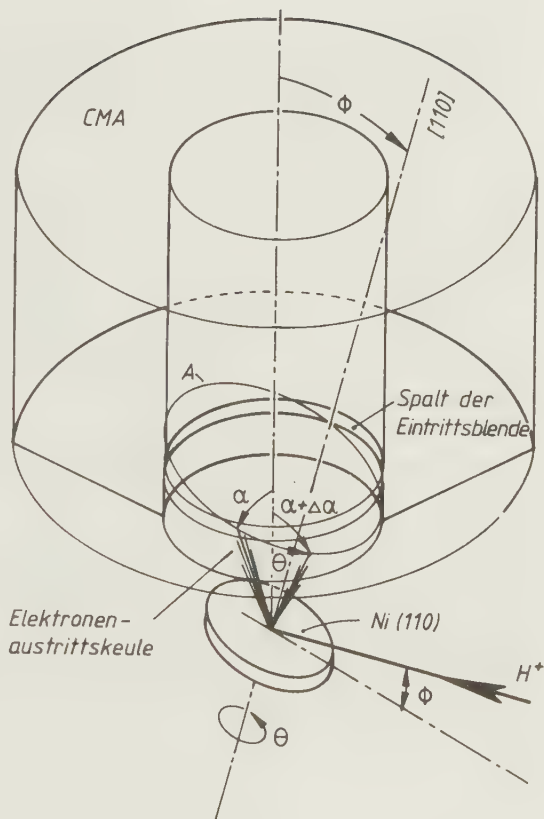


Abb. 3.5: Schematischer Aufbau zur Messung ioneninduzierter Auger-Elektronen unter den Bedingungen der Oberflächen-Ionen-gitterführung. Der CMA dient zur Energieanalyse der vom Ionenstrahl ausgelösten Elektronen. ϕ : Einschubwinkel des Ionenstrahls zur Oberfläche. θ : Lateraler Einschubwinkel zu einer niederindizierten Richtung in der Oberfläche. α : Eintrittswinkel der Elektronen in den CMA.

Manipulators, unabhängig voneinander, x-, y- und z-Translationen sowie Φ - und Θ -Rotationen des Kristalls möglich. Die Justierung der Probe bezüglich des Ionenstrahls wird sukzessive optimiert. Dazu zentriert man den Kristall auf die Längsachse des Elektronenenergieanalysators. Danach erfolgt die Festlegung des Nullpunkts des Einschubwinkels Φ . Anschließend wird der Kristall nach Augenmaß parallel zum einfallenden Strahl ausgerichtet, so daß er den Strahl noch nicht berührt. Man beobachtet dazu das Schauglas, das im Auftreffpunkt des Strahls fluoresziert, und verfolgt den Targetstrom über ein empfindliches Amperemeter (Keithley 602), während man die Probe um die Achse der Erstrotation Φ dreht, bis kein Targetstrom mehr fließt. Diese Prozedur wird in immer geringeren Abständen zum Ionenstrahl wiederholt, bis die (110)-Oberfläche parallel zum Strahl ausgerichtet ist. Diese Stellung legt den Nullpunkt des Winkels Φ fest. Nun verschiebt man den Kristall parallel in den Strahl, bis der Strahl zur Hälfte vom Kristall abgeschattet wird. In dieser Position schwenkt man dann den Kristall um den im Experiment gewünschten Einschubwinkel Φ in den Ionenstrahl. Der Winkel Θ wird auf eine niederindizierte Richtung in der Oberfläche, entweder auf die [001]- oder die $[\bar{1}\bar{1}0]$ -Richtung, bezogen. Eine grobe Voreinstellung kann nach den Markierungen erfolgen, die aus der Laue-Aufnahme auf den Kristall übertragen wurden. Die exakte Orientierung der niederindizierten Richtung zum Ionenstrahl ergibt sich aus der Lage des Targetstrommaximums bei axialer Oberflächen-Ionengitterführung bzw. aus den Targetstromminima bei planarer Gitterführung. Die Orientierung des Kristalls bezüglich der festgelegten Nullpunkte, d.h. die Einstellung der Winkel Φ und Θ , überprüft man mit einem Laserstrahl. Der Laserstrahl wird von einem Polygonspiegel reflektiert, der starr mit dem Kristall verbunden ist, und auf einer Winkelskala zur Anzeige gebracht. Damit kann man die Winkel Φ und Θ unabhängig vom Spiel im Manipulatorantrieb mit einer Genauigkeit von $0,1^\circ$ einstellen. Im Experiment wurde $\Phi=1^\circ$ bei axialer und $\Phi=4,5^\circ$ bei planarer Gitterführung gewählt.

Abb. 3.6: Eintritt von anisotrop emittierten Elektronen in den CMA (hypothetischer Fall einer stark gerichteten Elektronenausstritts-keule, die fest an die Orientierung der Kristalloberfläche gebunden ist). Bei der Θ -Drehung des Kristalls beschreibt der Auftreffpunkt der Elektronenkeule auf dem inneren Zylinder des CMA die Kurve A. In einem gewissen Bereich von Θ kann die Elektronenkeule durch die ringförmige Eintrittsblende in den CMA eintreten.



Die Achse des CMA steht genau senkrecht auf dem einfallenden Protonenstrahl. Deshalb ist der Winkel zwischen der Oberflächennormalen und der CMA-Achse gleich Φ . Eine laterale Drehung um einen Winkel Θ ändert den Winkel α derjenigen Elektronenbahnen zur CMA-Längsachse, die nicht senkrecht zur (110)-Oberfläche austreten (siehe Abb. 3.6). Dieser Effekt kann natürlich nur dann von der Kristallorientierung abhängige Auger-Elektronenausbeuten bewirken, wenn die Auger-Elektronenemission anisotrop und nicht rotationssymmetrisch zur [110]-Richtung erfolgt. Als Extremfall kann man sich einzelne Elektronenaus-

trittskeulen vorstellen (wie ein LEED-Muster). Bei einer lateralen Drehung um einen Winkel Θ von 6° bei $\Phi=1^\circ$ bzw. von 12° bei $\Phi=4,5^\circ$ ändert sich der Polarwinkel α zur CMA-Längsachse um $\Delta\alpha = \Phi (1-\cos\Theta)$, also um $0,0055^\circ$ bzw. $0,098^\circ$. Dieser Winkel ist im Vergleich zum polaren Akzeptanzbereich des CMA von $\alpha_0 \pm \Delta\alpha_0 = 42,3^\circ \pm 6^\circ$ sehr klein. Das bedeutet, daß die Θ -Abhängigkeit der Auger-Elektronenausbeute allein durch die Veränderung des Ioneneinschußwinkels Θ zu einer niederindizierten Richtung verursacht wird und nicht durch irgendwelche Anisotropien in der Winkelverteilung der Auger-Elektronenemission. In den folgenden Abschnitten werden daher ausschließlich Effekte aufgrund der Variation des Ioneneinschußwinkels diskutiert. Bei der Auger-Elektronenemission aus Festkörpern wurden kleine Anisotropien beobachtet [7-9], die vom Auger-Prozeß selbst oder von Beugungseffekten beim Austritt aus dem Kristallgitter herrühren können. Innerhalb weniger Winkelgrade weisen jedoch solche Anisotropien keine starken Intensitätsschwankungen auf [7]. Die großflächige Anregung durch den Ionenstrahl würde auf jeden Fall zu sehr verschwommenen Anisotropien in der Raumwinkelverteilung der Auger-Elektronen führen. Im vorliegenden Experiment haben Anisotropien der Elektronenemission deshalb keinen Einfluß auf die Auger-Elektronenausbeuteprofile.

3.3. Elektronenenergieanalysator

Bei den Einschußwinkeln des Experiments $\Phi=1^\circ$ bzw. $4,5^\circ$ regt der einfallende Ionenstrahl Atome zur Elektronenemission an, die in einem Streifen von der Breite des Strahldurchmessers von 2mm und der Länge des gesamten Kristalldurchmessers von 15mm liegen. Die aus diesem Gebiet emittierten Elektronen werden in einem Zylinderspiegelanalysator (Cylindrical Mirror Analyzer - CMA) nach ihrer Energie separiert. Es handelt sich hierbei um einen einstufigen CMA von Varian mit einem Energieanalysierbereich von 0 bis 3000eV. Der auf Erdpotential liegende innere Zylinder hat

einen Durchmesser a von 30mm und der äußere Zylinder einen Durchmesser A von 70mm. Bei einem Elektroneneintrittswinkel α von $\alpha_0=42,3^\circ$ ist das Verhältnis der Elektronenenergie E_e zum Potential V des äußeren Zylinders [10]

$$E_e/V = 1,3098 / \ln(A/a) \quad (3.1)$$

gleich 1,58. Der CMA wird mit einer Transmission T_0 von 0,0585 (11,7% der Halbkugel) und einer Energieauflösung $\Delta E_e/E_e < 0,01$ spezifiziert [11]. Diese Werte gelten jedoch nur für eine nahezu punktförmige Elektronenemission, wie sie bei der Anregung der Probe mit einem scharf fokussierten Elektronenstrahl der integrierten Elektronenkanone erreicht wird. Gewöhnlich betreibt man CMAs in der Achs-zu-Achs-Abbildung [10, 12, 13] in Fokussierung 2. Ordnung. In dieser Anordnung, bei der der polare Eintrittswinkel α des CMA genau $\alpha_0=42,3^\circ$ beträgt, wird die punktförmige Elektronenquelle auf der Achse wieder in einen Bildpunkt auf der Achse abgebildet (Abb. 3.7a). Die ringförmigen Eintritts- und Austrittsblenden im inneren Zylinder mit dem Durchmesser a haben die Breite w . Sie bestimmt die Transmission T_0 und die Energiegrundauflösung R_0 (basis resolution) [10]:

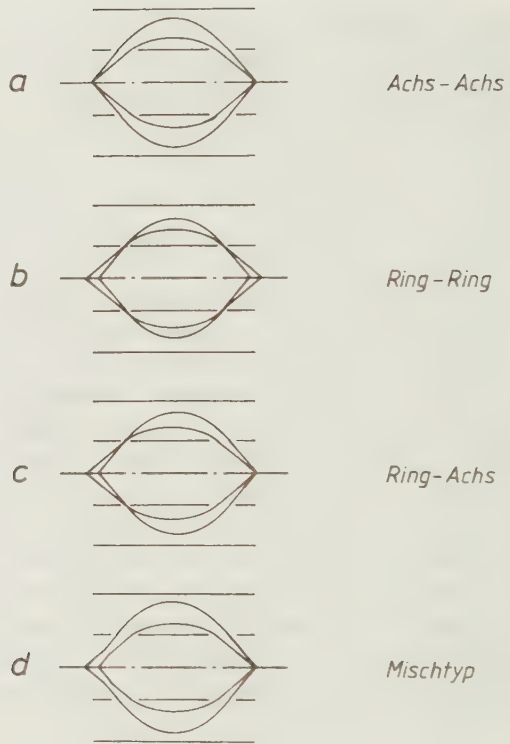
$$T_0 = \Delta\Omega/4\pi = \Delta\alpha \sin \alpha_0 \quad (3.2)$$

mit

$$\Delta\alpha = (w/a) \tan^2\alpha_0 / (1 + \tan^2\alpha_0) \quad (3.3)$$

$$R_0 = \Delta E_e/E_e = 21 T_0^3. \quad (3.4)$$

Abb. 3.7: Strahlengang im Zylinderspiegelanalyzer (CMA). (a)-(d) Abbildungsgeometrien mit Fokussierung 2. Ordnung. (d) Blendenanordnung im vorliegenden Experiment.



Eine Fokussierung 2. Ordnung bedeutet, daß die Winkelabweichung $\Delta\alpha$ des Eintrittsstrahlenbündels vom Mittelstrahl bei α_0 sich in einer sphärischen Aberration auswirkt, in die nur noch Terme mit höherer als der 2. Potenz von $\Delta\alpha$ eingehen. Neben der Achse-zu-Achse-Abbildung existieren auch noch andere Anordnungen mit einer Fokussierung 2. Ordnung, z.B. die Ring-zu-Achse-Abbildung [14] und die Ring-zu-Ring-Abbildung [13, 14] (Abb. 3.7b und c). Bei der Ring-zu-Achse-Abbildung ergibt sich eine Fokussierung 2. Ordnung bei einem polaren Eintrittswinkel α von $\alpha_0 = 33,8^\circ$ [14]. In dieser Anordnung wird der Eintrittsblendenring in einen Bildpunkt auf der Achse abgebildet. Dies gilt natürlich nur für Elektronenbahnen, die radial zur Achse verlaufen. Die Austrittsblende bleibt ein Schlitz von endlicher Breite im

inneren Zylinder, während die Breite der Eintrittsblende gegen Null geht. Im Experiment liegt eine Mischung aus Achs-zu-Achs- und Ring-zu-Achs-Abbildung vor (Abb. 3.7d), denn sowohl die Elektronenquelle als auch Eintritts- und Austrittsblenden sind von endlicher Ausdehnung. Lediglich das Bild wird durch eine weitere Blende vor dem Kollektor auf infinitesimale Ausdehnung beschnitten. Diese punktförmige Kollektorblende begrenzt zusammen mit der Eintrittsblende das Elektronenstrahlenbündel und bestimmt damit eine effektive Analysierzone der Elektronenquelle. Aksela [13] hat gezeigt, daß unter solchen Voraussetzungen eine Fokussierung 1. Ordnung eine bessere Energieauflösung erbringen kann als eine Anordnung, die eine Fokussierung 2. Ordnung anstrebt und dabei ein überstarkes Anwachsen der Terme der 3. Potenz außer Acht läßt. Eine theoretische Beurteilung der elektronenoptischen Eigenschaften eines CMA, der Elektronen aus einer flächenhaften Quelle analysieren soll, ist nur dann sinnvoll, wenn man die Übertragungsfunktion des CMA (einschließlich Abbildung nichtaxialer Strahlen) und die Signalstärke berücksichtigt [13, 16, 17]. Die Beurteilung der Auflösung mit der sog. Grundauflösung R_0 , wie dies bei Ref. [10] geschieht, führt bei flächenhaften Quellen zu Fehleinschätzungen. In den vorliegenden Untersuchungen ist eine gute Energieauflösung nicht so entscheidend wie eine hohe Empfindlichkeit bzw. ein großes Signal-Rauschverhältnis. Um das Auger-Elektronensignal zu optimieren, verschiebt man den CMA längs seiner Symmetrieachse. Wesentlich dabei ist, daß die Führung eine genaue Bewegung längs der CMA-Achse gewährleistet, ohne Achsverkippungen oder Achsversetzungen, weil sonst das Elektronenquellgebiet aus der effektiven Analysierzone des CMA wandern könnte. Die Abhängigkeit, gemessen als Spitze-Spitze-Wert im einmal differenzierten Spektrum $N'_e(E_e)$, ist in Abb. 3.8 wiedergegeben. Der beste Abstand Probe-Front CMA liegt bei 8mm und ist damit etwas größer als der Wert von 6,1mm, den der Hersteller für den Betrieb mit der integralen Elektronenkanone empfiehlt [11]. Dieses Ergebnis macht deutlich, daß bei einer flächenhaften Elektronenquelle die Abbildung weg von der

Achs-zu-Achs- hin zur Ring-zu-Achs-Abbildung gehen muß. In einem Abstand von 8mm mißt man bei Elektronenemission aus einer flächenhaften Quelle, wie sie bei Anregung durch den Ionenstrahl vorliegt, eine Energieauflösung $\Delta E_e/E_e$ von 0,04. Der Wert ΔE_e wurde in einem einmal differenzierten Spektrum $N'_e(E_e)$ als Energiedifferenz vom oberen zum unteren Scheitelwert der Nickel- L_3VV -Auger-Linie bei 848eV bestimmt, wobei die Modulation der Ablenkspannung zwischen den Zylindern des CMA einer Energie von 10eV entsprach.

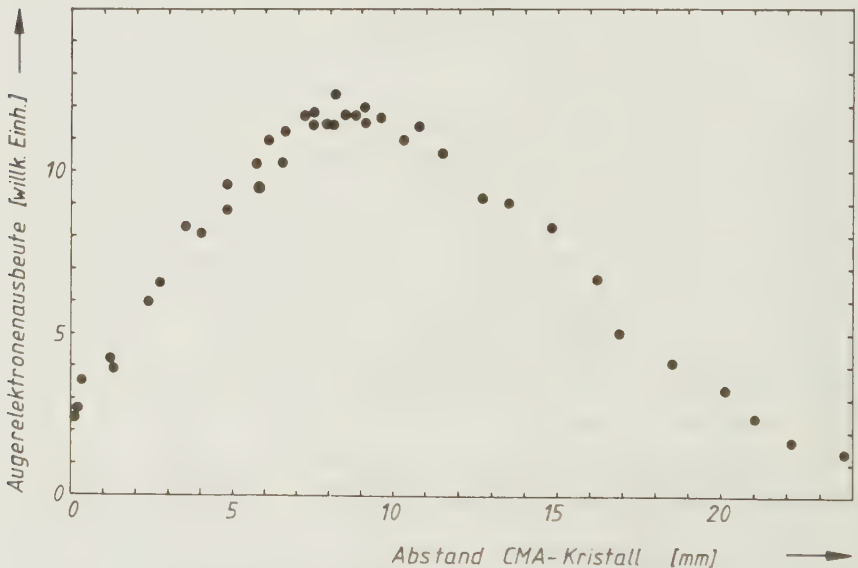


Abb. 3.8: Auger-Elektronenausbeute in Abhängigkeit von der Positionierung des CMA.

Während der Reinigung des Kristalls durch Ionenzerstäubung muß der CMA zurückgefahren werden. Um bei anschließenden Messungen die alte Position und Ausrichtung reproduzierbar einnehmen zu können, wurde für den CMA eine Verschiebevorrichtung (Abb. 3.9) gebaut. Die relativ hohe Positioniergenauigkeit von 0,05mm, unter Einbeziehung des Führungsspiels

und der Durchbiegung, wird auch durch Ausheiztemperaturen bis 250°C nicht beeinträchtigt. Da zum Ausheizen keine Demontage der Verschiebevorrichtung erforderlich ist - lediglich der Antriebsmotor muß entfernt werden -, wird eine hohe Reproduzierbarkeit der Positionierung gewährleistet. Vor dem Anflanschen an die Verschiebevorrichtung wird der CMA auf seinen Trägerflansch ausgerichtet. Dazu kann das hintere Ende des CMA (Detektorseite, dem Trägerflansch zugewandt) mittels Stellschrauben (für die Verschiebung in den drei Raumrichtungen) zur Flanschachse zentriert und längs dieser Achse verschoben werden. Die Zentrierung des vorderen Teils des CMA, also der Elektroneneintrittsseite, erfolgt mit Hilfe weiterer Stellschrauben, die eine Verkipfung der CMA-Längsachse zur Flanschachse erlauben.

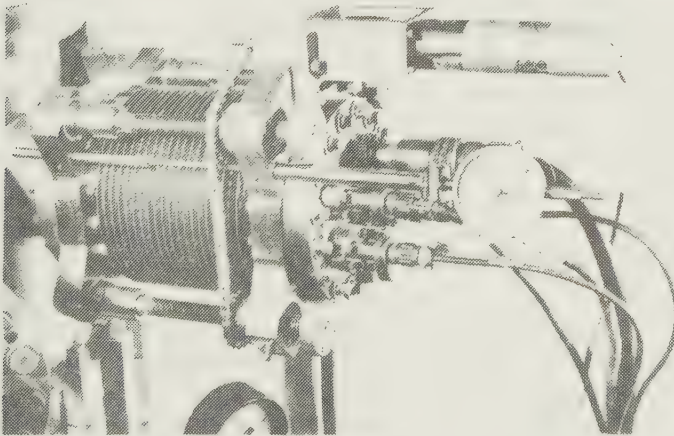


Abb. 3.9: Vorrichtung zum Verfahren des CMA in Richtung seiner Längsachse. Ein Elektrotriebemotor treibt über eine Kette synchron die Bewegungsmuttern auf den 4 feststehenden Spindeln an und bewegt dadurch das dem Betrachter zugewandte Flanschende.

3.4. Empfindlichkeit

Als Empfindlichkeitsgrenze definiert man bei oberflächen-spezifischen Meßmethoden üblicherweise die Flächendichte von Atomen, bei der das Signal-Rauschverhältnis gerade 1 wird [18]:

$$\text{Signal-Rauschverhältnis} = I_A/I_R. \quad (3.5)$$

I_A ist der Strom der Auger-Elektronen und I_R der Strom aufgrund des Rauschens. Der am CMA-Ausgang meßbare Auger-Elektronenstrom I_A der Auger-Linie WXY beträgt bei alleiniger Anregung der obersten Atomlage mit Protonen:

$$I_{A_{WXY}} = I_1 \sigma_{IW}(I_0n) P_{A_{WXY}} n_A (\Delta\Omega/4\pi) \quad (3.6)$$

I_1 : Einfallender Protonenstrom;

$\sigma_{IW}(I_0n)$: Ionisationswirkungsquerschnitt der W-Schale durch direkten Ionenbeschuß (vgl. Abschnitt 4.2);

$P_{A_{WXY}}$: Wahrscheinlichkeit für einen WXY-Übergang, wenn ein Loch in der W-Schale vorliegt (vgl. Abschnitt 4.4);

$\Delta\Omega$: Vom CMA erfaßter Raumwinkel, $\Delta\Omega = 4\pi T_0$;

n_A : Flächendichte der angeregten Atomlage.

Für die Nickel- L_3VV -Auger-Linie bei 848eV errechnet sich bei Beschuß einer Nickelatomlage mit einem Strom $I_1=3\cdot 10^{-7}A$ von 150keV-Protonen ein Auger-Elektronenstrom $I_A(L_3VV)$ von $2,4\cdot 10^{-13}A$. Dabei wird die Flächendichte der Nickelatome in der (110)-Ebene mit $n_A=11,3\cdot 10^{14}cm^{-2}$ angesetzt und die Transmission T_0 des Varian-CMA von 0,0585 zugrunde gelegt.

Das Rauschen setzt sich aus mehreren Beiträgen zusammen. Einer davon ist das Widerstandsrauschen am Ladewiderstand des Elektronenvervielfacherkanals (Channeltron). Einen weiteren Beitrag stellt das Schottky-Rauschen (Schrotrauschen, Shot-Noise) dar, das daher rührt, daß die Ladung nur als ganzzahliges Vielfaches der Elementarladung e auftritt [19]:

$$I_R = \sqrt{2 e I_e(E_e) \Delta v} \quad (3.7)$$

$I_e(E_e)$: Gesamter, vom CMA bei der Analysierenergie E_e durchgelassener Elektronenstrom, also Auger-Elektronenstrom und Elektronenuntergrund.

Zu diesen Rauschquellen, die mit dem Prinzip der Messung eng verknüpft sind, kommt noch das Rauschen des Elektronenvervielfacherkanals aufgrund ionisierender Strahlung und das Rauschen der nachgeschalteten Elektronik. Im wesentlichen wird jedoch das Rauschen durch das Schottky-Rauschen bestimmt [4]. Den Elektronenstrom $I_e(E_e)$ kann man durch zwei extreme Werte abschätzen: $I_e(E_e) = I_1$ und $I_e(E_e) = I_A(L_3VV)$. Mit einer Zeitkonstante des Lock-in-Verstärkers von $\tau = 1\text{s}$ ergibt sich ein Rauschstrom I_R von $3,1 \cdot 10^{-13}\text{A}$ bzw. $2,8 \cdot 10^{-16}\text{A}$. Damit resultiert eine rechnerische Empfindlichkeit von 1 bis 1/1000 Monolage. Der Auger-Elektronenstrom $I_A(KL_{23}L_{23})$ der Sauerstoff- $KL_{23}L_{23}$ -Auger-Linie bei 510eV beträgt unter sonst gleichen Voraussetzungen (Flächendichte wie die der Nickelatome) $8,2 \cdot 10^{-13}\text{A}$. Hierbei erwartet man eine Empfindlichkeit zwischen 1/2 und 1/1600 Monolage. Genauere Abschätzungen der Empfindlichkeit sind nur möglich, wenn man den Elektronenstrom $I_e(E_e)$ aus einem undifferenzierten Spektrum $N_e(E_e)$ kennt. In Abschnitt 6.2 wird über Messungen berichtet, bei denen ioneninduzierte $KL_{23}L_{23}$ -Auger-Signale von Sauerstoff ab einer Bedeckung von 1/20 Monolage registriert werden konnten.

3.5. Elektronik

Der Strom der Elektronen kann nach der Energieanalyse im CMA in einem Hochstrom-Elektronenvervielfacherkanal (Channeltron Galileo 4720 G) bis zu 10^7 -fach verstärkt werden. Bei der Auger-Elektronenspektroskopie ist man im allgemeinen nur an den Auger-Linien interessiert und trennt deshalb den Elektronenuntergrund ab, indem man das emittierte Elektronenspektrum $N_e(E_e)$ differenziert. Dazu bedient man sich der Lock-in-Technik. Wird die Analysierspannung im CMA mit einem

zusätzlichen Signal der Frequenz ν moduliert, so liefert die Komponente der Grundfrequenz ν gerade die 1. Ableitung $N'_e(E_e)$ und die 1. Harmonische auf 2ν die 2. Ableitung $N''_e(E_e)$. Die Wechselspannungsanteile im Meßsignal, ν , $2\nu, \dots$, werden kapazitiv ausgekoppelt und selektiv entweder die Frequenzkomponente ν oder 2ν verstärkt, phasenbezogen zum Modulations-signal gleichgerichtet und durch Tiefpässe geglättet. Beim Aufnehmen ioneninduzierter Auger-Elektronenspektren hat sich gezeigt, daß die 2. Ableitung $N''_e(E_e)$ besser geeignet ist zur Auswertung der Peakhöhen als die 1. Ableitung. Dies gilt insbesondere für Auger-Peaks in steilen Flanken, z.B. für die Sauerstoff-KL₂₃L₂₃-Auger-Linie bei 510eV. Dabei ergibt sich sogar ein größeres Signal-Rauschverhältnis als in der 1. Ableitung. Eine genaue Herleitung findet man in Ref. [20 S.220ff]. Wenn man gaußförmige Auger-Elektronenpeaks im $N_e(E_e)$ -Spektrum annimmt, ist die Peakhöhe auch in den differenzierten Spektren proportional zum Auger-Elektronenstrom des jeweiligen Auger-Peaks. Für andere Peakformen braucht das nicht zu gelten, insbesondere kann sich durch chemische Effekte die Form eines Auger-Peaks verändern und damit auch die Peakhöhe der 1. oder 2. Ableitung variieren, ohne daß sich der integrale Auger-Elektronenstrom dieses Peaks verändert. In allen Messungen außer in Abschnitt 6.2 wird deshalb immer unter konstanten Bedeckungsverhältnissen gemessen, so daß während einer Meßreihe keine chemischen Prozesse mehr ablaufen und sich die Form der Auger-Elektronenpeaks nicht mehr ändert.

4. Physikalische Grundlagen

4.1. Oberflächen-Ionengitterführung

Schnelle Ionen, die auf einen Kristall entlang niederindizierter Richtungen einfallen, werden durch die Atomketten geführt. Dieser Effekt ist als Ionengitterführung bekannt. Eine solche Führung erfahren auch Ionen, die streifend zur Oberfläche entlang niederindizierter Gitterrichtungen eingeschossen

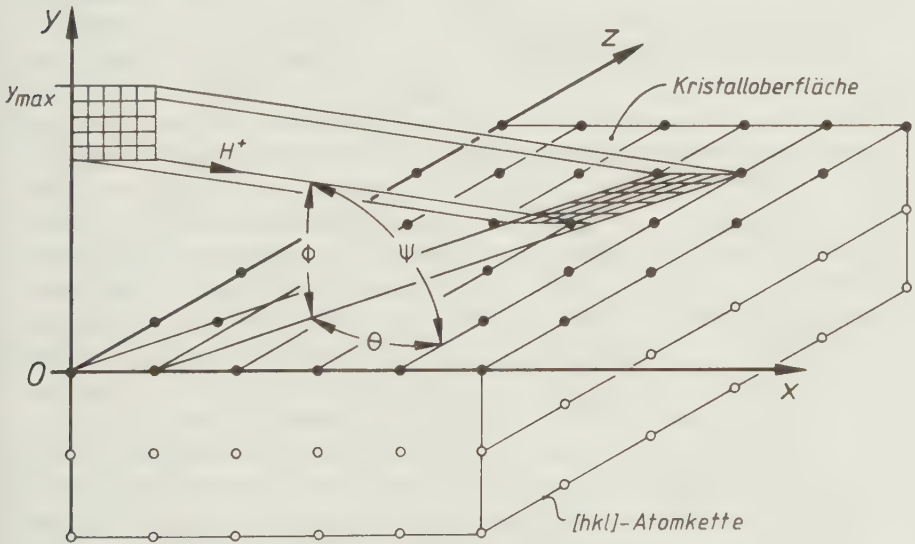


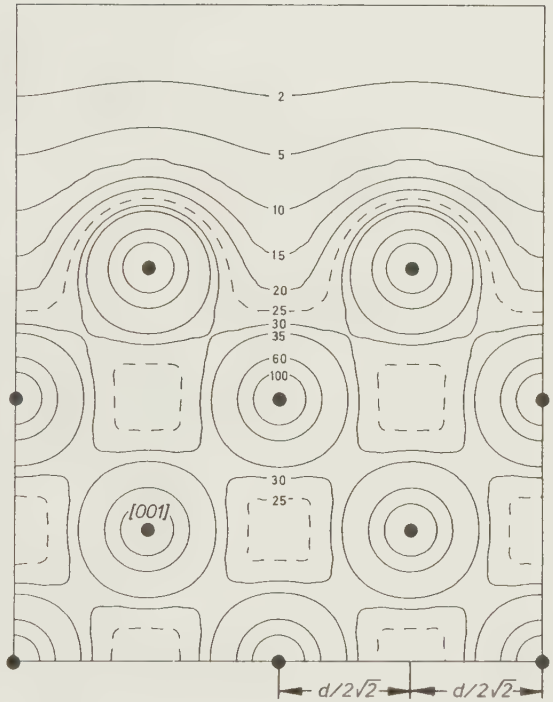
Abb. 4.1: Schematische Darstellung des Ioneneinfalls auf eine Kristalloberfläche mit den Koordinaten und den Einschußwinkeln, die in den Experimenten und Simulationsrechnungen zur Ionengitterführung verwendet werden. Das Auftreffgebiet der Projektile sowie ihr Startgebiet in der Computersimulation sind schraffiert (näheres in Abschnitt 5). Die Atome in den $[hkl]$ -Führungsketten sind durch Linien verbunden.

werden; man spricht von Oberflächen-Ionengitterführung (surface channeling) [21]. Der Einfallswinkel zwischen dem Ionenstrahl und der Oberflächenebene, im vorliegenden Fall der Ni(110)-Ebene, wird ϕ genannt. Mit θ bezeichnet man den lateralen Winkel zwischen Ionenstrahl und einer niederindizierten Richtung in der Oberfläche (vgl. Abb. 4.1).

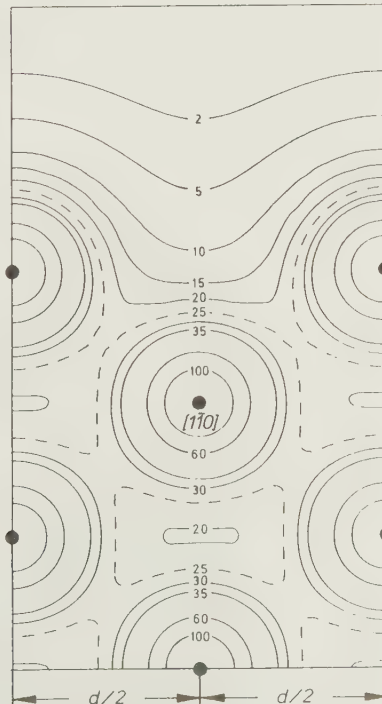
Die Streuung der Ionen entsteht durch sukzessive korrelierte Stöße mit vielen Atomen entlang der niederindizierten Richtung. Dies ermöglicht, die Oberflächen-Ionengitterführung mit Lindhards Konzept der Kontinuumpotentiale (Zylinderpotentiale) [22] wie bei der axialen Gitterführung im Kristallinneren zu beschreiben. Demzufolge erfahren die Ionen bei streifendem Einfall entlang einer Hauptkristallrichtung eine starke Führung durch das abstoßende Potential der Atomketten (vgl. Abb. 4.2). Ein wichtiger Aspekt für die Anwendung der Ionengitterführung in den hier diskutierten Experimenten ist, daß die Ionenflußdichte an den Atomketten reduziert und zwischen den Ketten verstärkt ist (vgl. Abb. 4.3a). Im Mittel besitzen die geführten Ionen zu den Atomen in den Ketten einen großen Stoßparameter. Stoßparameterabhängige Reaktionen zeigen eine Abnahme der Reaktionsausbeute Y , wenn die Ionen parallel zu den kristallographischen Hauptrichtungen einfallen. Die Ionisation innerer Schalen mit anschließender Auger-Elektronenemission ist ein Beispiel für solch eine Reaktion. Vergrößert man den Winkel θ zwischen dem Ionenstrahl und der niederindizierten Richtung $[hkl]$, so wird der Führungseffekt kleiner und der Ionenfluß verteilt sich gleichmäßiger (vgl. Abb. 4.3b-d). Infolgedessen vermindert sich der mittlere Stoßparameter zwischen den Projektilen und den Atomen in den $[hkl]$ -Ketten, und somit erhöht sich die Ausbeute an Auger-Elektronen. Man erreicht schließlich einen Winkel θ , ab dem die Ionen willkürlich auf Targetatome treffen (random). Dabei erhält man eine Auger-Elektronenausbeute Y_{random} , die einem Wert entspricht, den man in einem amorphen Material messen würde. Die Winkelabhängigkeit der Auger-Elektronenausbeute Y , wie sie in Gitterführungsexperimenten gemessen wird, ist schematisch in Abb. 4.4 dargestellt.

(a)

Abb. 4.2: Äquipotentiallinien der Wechselwirkung Proton-Kristallatom an der sauberen Ni(110)-Oberfläche im transversalen Schnitt (a) zur $[001]$ - und (b) zur $[1\bar{1}0]$ -Richtung. Der dargestellte Potentialverlauf beruht auf der Überlagerung von Kontinuumpotentialen der Atomketten. Für die Wechselwirkung Proton-Nickelatom wird das Thomas-Fermi-Potential in der Molière'schen Näherung nach Gl. (5.7) benutzt. (●) Position der Nickelatomketten; Gitterkonstante $d=0,352\text{nm}$. Die potentielle Energie der Protonen in dem genannten Potential ist in Einheiten von $[eV]$ angegeben.



(b)

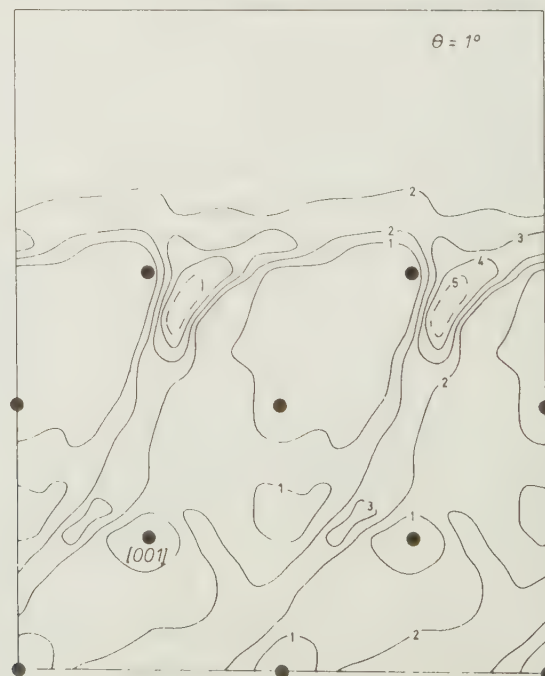


(a)

Abb. 4.3: Flußdichteverteilungen von 150keV-Protonen bei axialer Oberflächengitterführung für verschiedene laterale Einschubwinkel $\theta=0^\circ$, $0,5^\circ$, $1,0^\circ$ und $1,5^\circ$ zur $[001]$ -Richtung. Die Ergebnisse beruhen auf Computersimulationen, wobei eine saubere Ni(110)-Oberfläche zugrunde gelegt ist ($\phi=1^\circ$, $T=300\text{K}$, stufenfreie Oberfläche, 80×40 Projektile). Die Flußdichte ist in Ebenen transversal zur $[001]$ -Richtung gemessen und auf die einfallende Flußdichte normiert. (●) Position der Nickelatomketten; Gitterkonstante $d=0,352\text{nm}$.

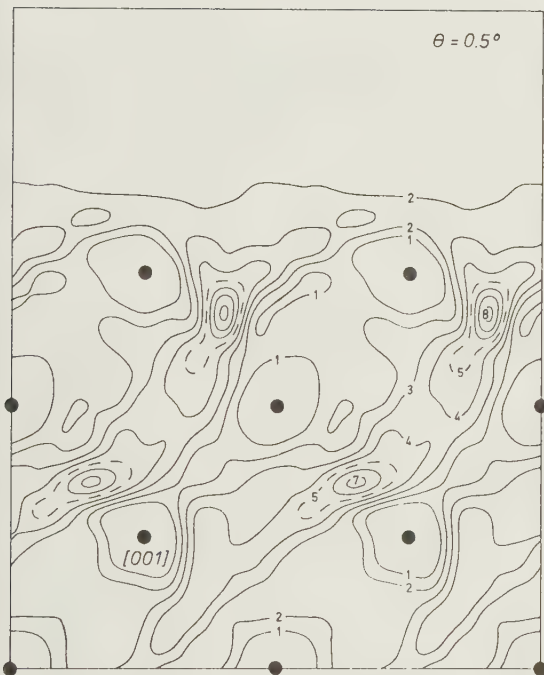


(c)



$\theta = 0.5^\circ$

(b)



$\theta = 1.5^\circ$

(d)

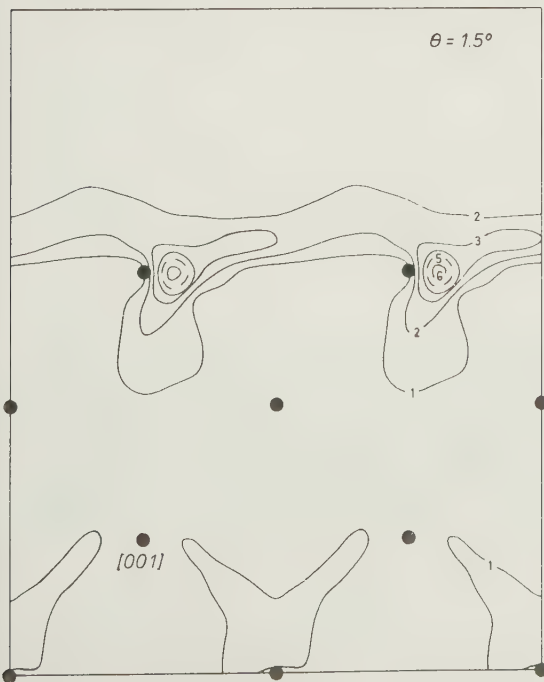
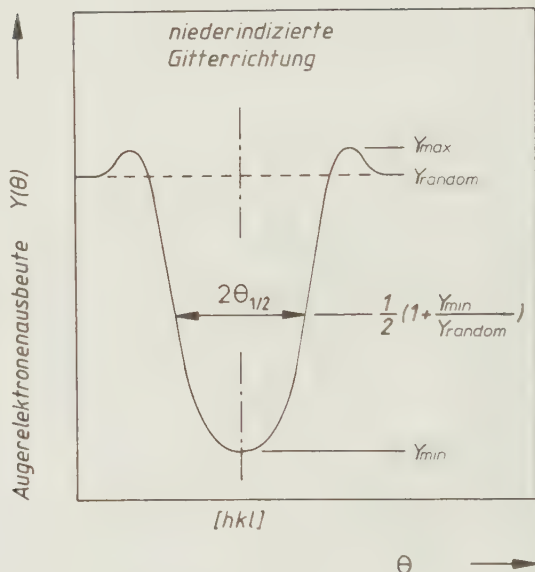


Abb. 4.4: Auger-Elektronenausbeuteprofil in Abhängigkeit vom lateralen Einschubwinkel θ , wie es in Experimenten zur Oberflächen-Ionengitterführung gemessen wird.



Die halbe Halbwertsbreite $\theta_{1/2}$ des Ausbeuteprofiles $Y(\theta)$ kann in einer ersten Näherung aus der Lindhard'schen Theorie der axialen Gitterführung ermittelt werden [22]:

$$\psi_{1/2} = \sqrt{\frac{2 Z_1 Z_2 e^2}{E_1 d_{a[\text{hkl}]}}} \quad (4.1)$$

mit

$$\theta_{1/2} = \sqrt{\psi_{1/2}^2 - \phi^2}, \quad (4.2)$$

wobei Z_1 und Z_2 die Kernladungszahlen von Projektil und Targetatom sind, E_1 die Energie des einfallenden Ions und $d_{a[\text{hkl}]}$ der Atomabstand in der $[\text{hkl}]$ -Kette. Für eine genauere Abschätzung sei auf Ref. [6, 23] verwiesen. Sind Z_1 , Z_2 , E_1 und ϕ im Experiment fest vorgegeben, so ist die Halbwertsbreite $\theta_{1/2}$ ein Maß für den Atomabstand $d_{a[\text{hkl}]}$ in den Führungsketten. Theo-

retische Werte von $\Psi_{1/2}$ und $\Theta_{1/2}$, sowie Daten aus Experimenten und Computersimulationen sind für die in dieser Arbeit gewählte Substrat-Adsorbat-Kombination in Tabelle 7.1 zusammengefaßt.

4.2. Ionisation

Im allgemeinen können sehr verschiedenartige Prozesse Auger-Elektronen hervorbringen. Voraussetzung dazu ist in jedem Fall, daß Löcher in inneren Schalen vorhanden sind. In der folgenden Diskussion wird der Schwerpunkt auf jene Ionisationsprozesse gelegt, die beim Beschuß von Nickel und Sauerstoff mit 150keV-Protonen eine Rolle spielen könnten. Die Ionisation innerer Schalen kann durch das stoßende Ion selbst erfolgen oder aufgrund der Wirkung eines schnellen Rückstoßatoms, eines Elektrons oder eines Photons, das durch das einfallende Ion erzeugt worden ist. Im ersten Fall unterscheidet man zwischen der statischen Potentialelektronenemission, bei der die potentielle Energie des einfallenden Ions ausschlaggebend ist, und der kinetischen Elektronenemission, bei der die Energie zur Elektronenfreisetzung von der kinetischen Energie des Projektils stammt.

Insbesondere bei der Verwendung von Protonen als Projektil - bei Protonen beträgt das tiefste Energieniveau $E_K=13,6\text{eV}$ - kann die Potentialelektronenemission Elektronen von höchstens 3,5eV freisetzen:

$$E_e = E_K - 2E_A \quad (4.3)$$

E_K : Energieniveau der K-Schale des Projektils;

E_A : Austrittsarbeit, z.B. aus Ni(110): $E_A=5,04\text{eV}$ [24].

Im Energiebereich der Auger-Linien, der für die Oberflächenanalyse mit Ionengitterführung relevant ist (Ni-M₂₃VV: $E_{M_{23}}=68\text{eV}$, Ni-L₃VV: $E_{L_3}=855\text{eV}$), hat dieser Mechanismus keine Bedeutung.

Bei der kinetischen Elektronenemission betrachtet man zwei Grenzfälle: Die Coulombionisation und die Molekülorbitalanregung. Die Molekülorbitalanregung beruht darauf, daß bei der Kollision eines langsamen Ions mit einem Atom die Elektronen ihre Orbitalzustände adiabatisch der Bewegung der beiden Kerne anpassen [25 S.62ff]. Dabei können bei der Trennung beider Stoßpartner Elektronen aus Targetorbitalen in nicht besetzte Projektilorbitale überwechseln, wenn sich die beteiligten Energieniveaus bei der Kollision angeglichen haben (Electron Promotion). Dieser Prozeß verspricht nur dann ausreichende Wirkungsquerschnitte, wenn die Kernladungszahlen von Target und Projektil, Z_1 und Z_2 , vergleichbar sind. Die Korrelationsdiagramme für diatomare Molekülorbitale $H^+ + Ni$ und $H^+ + O$ zeigen keine Möglichkeit, Löcher vom 1s-Wasserstofforbital zum 2s-, 2p-, 3s- oder 3p-Nickelorbital zu verschieben. Das Fehlen stabiler Elektronenorbitale bei Protonen in Metallen, wie von Brandt [26 S.268] angenommen, macht die Molekülorbitalionisation im Kristallinneren unwahrscheinlich. Als primärer Ionisationsprozeß innerer Schalen bleibt also nur noch die Coulombionisation.

4.2.1. Coulombionisation

In der Coulombionisation wird der Elektronenübergang auf die Störung eines Atoms durch das vorbeibewegte Coulombpotential des Projektils zurückgeführt. Die Coulombwechselwirkung koppelt direkt den ursprünglich gebundenen Elektronenzustand in einer inneren Schale mit ungebundenen Kontinuumslektronenzuständen. Diese Art der Ionisation ist zutreffend für Stöße zwischen Projektilen mit niedriger Kernladungszahl Z_1 und Targetatomen mit hoher Kernladungszahl Z_2 , wenn die Projektilgeschwindigkeit v_1 groß ist gegenüber der Orbitalgeschwindigkeit v_W des freizusetzenden Elektrons [25 S.60]:

$$Z_1/Z_2 \ll 1 \quad \text{und} \quad Z_1/Z_2 \ll v_1/v_W. \quad (4.4)$$

Für die Energie eines Protons ergibt sich daraus folgende Forderung: $E_1 \gg 160 \text{ eV}$ für die Coulombionisation der Nickel- M_{23} -Schale, $E_1 \gg 2 \text{ keV}$ für die Nickel- L_3 -Schale und $E_1 \gg 15,3 \text{ keV}$ für die Sauerstoff-K-Schale. Ein Coulombpotential ist insbesondere bei nackten einfachen Projektilen, z.B. Protonen, Alpha-Teilchen und Elektronen, gerechtfertigt.

Zur Behandlung der Coulombionisation gibt es drei theoretische Ansätze:

- Plane-Wave Born Approximation (PWBA): Quantenmechanische Streutheorie, bei der nur die 1. Streuphase berücksichtigt wird. Das Projektil wird als ebene Welle angesehen und erfährt keine Ablenkung durch das Atom [27-32].
- Binary-Encounter Approximation (BEA): Klassischer Stoß zwischen Projektil und freiem Elektron. Das restliche Atom ist passiv und sorgt nur für eine Geschwindigkeitsverteilung des freizusetzenden Elektrons. Die Streuung des Projektils durch das Atom wird nicht berücksichtigt, ebenso geht die Bindung des Elektrons nur über die Geschwindigkeitsverteilung des Elektrons ein [29-32].
- Semiclassical Approximation (SCA): Zeitabhängige quantenmechanische Störungsrechnung, bei der sich das Projektil auf einer festen Trajektorie an dem Atom vorbeibewegt. Das Projektil wird nicht als einfallende Welle, sondern als zeitlich veränderliches Störpotential betrachtet. Da diese Methode die Stoßparameterabhängigkeit der Ionisation zum Ausdruck bringt, ist sie besonders geeignet, die Ionisation durch geführte Ionen zu ermitteln. Die SCA-Berechnungen, von Hansteen et al. eingeführt, sind sowohl mit geraden Trajektorien (straight-line version of SCA) als auch mit hyperbolischen Trajektorien durchgeführt worden, die der Coulombabstoßung des Projektils Rechnung tragen [33-36].

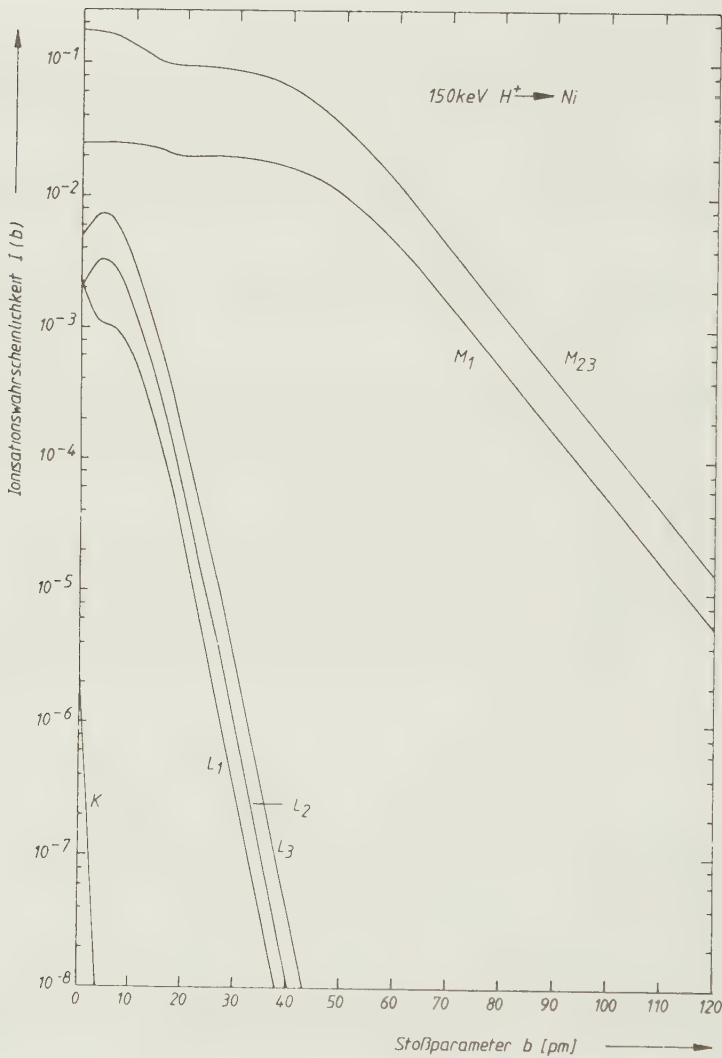


Abb. 4.5: Ionisationswahrscheinlichkeit der K-, L_1 -, L_2 -, L_3 -, M_1 - und M_{23} -Schale von Nickel beim Einschub eines Protons mit dem Stoßparameter b und der Energie $E_1=150 \text{ keV}$ [36].

Neben der Abhängigkeit vom Stoßparameter b und der Projektilenergie E_1 hängt die Ionisationswahrscheinlichkeit auch vom Orbital des Targetatoms ab, das ionisiert werden soll. Die Ionisationswahrscheinlichkeiten $I(b)$ der K-, L₁-, L₂-, L₃-, M₁- und M₂₃-Schale von Nickel bei der Anregung mit 150keV-Protonen sind in Abb. 4.5 dargestellt. Die abgebildeten Funktionen $I(b)$ beinhalten nur die primäre Ionisation durch den direkten Ionenstoß selbst. Bei der Beschreibung der Computersimulation wird in Abschnitt 5.5 nochmals auf die numerische Seite der Ionisationswahrscheinlichkeiten eingegangen.

Durch Integrieren der Ionisationswahrscheinlichkeit $I(b)$ über alle vorkommenden Stoßparameter b (d.h. alle Trajektorien) erhält man den Wirkungsquerschnitt für die Ionisation:

$$\sigma_{I(Ion)}(E_1) = 2\pi \int_0^{\infty} I(E_1, b) b db \quad (4.5)$$

$I(E_1, b)$: Ionisationswahrscheinlichkeit einer inneren Schale durch direkten Ionenstoß;

b : Stoßparameter des Projektils;

E_1 : Energie des Projektils;

$\sigma_{I(Ion)}$: Totaler Ionisationswirkungsquerschnitt einer inneren Schale durch direkten Ionenstoß (Ion).

Aus Gl. (4.5) ergibt sich [36]:

$$\sigma_{I(Ion)}(E_1) = \mu_{nl} \frac{2j+1}{2l+1} \frac{10^{-24}}{Z_{eff}^2} \frac{E_0}{n^2 E_W} F_{nl} \left(\frac{10^3 n E_W}{E_0 Z_{eff} \sqrt{E_1}} \right) \quad (4.6)$$

F_{nl} : Verallgemeinerter Wirkungsquerschnitt; tabelliert in [36];

E_W : Bindungsenergie des freizusetzenden Elektrons;

E_0 : Rydbergenergie, $E_0=13,6\text{eV}$;

$Z_{2\text{eff}}$: Effektive Kernladungszahl des Targetatoms;

K-Schale $Z_{2\text{eff}} = Z_2 - 0,3$

L_1, L_2, L_3 -Schale $Z_{2\text{eff}} = Z_2 - 4,15$

M_1, M_2, M_3 -Schale $Z_{2\text{eff}} = Z_2 - 11,25$

M_4, M_5 -Schale $Z_{2\text{eff}} = Z_2 - 21,15$;

n, l, j : Quantenzahlen des ionisierten Orbitals;

μ_{n1} : Tabellierte Konstante [36], $\mu_{n1} \approx 1$.

Alle Energien sind in [eV] einzusetzen, um den Wirkungsquerschnitt in [cm^2] zu erhalten.

Die Coulombionisation erreicht ihren größten Wirkungsquerschnitt im sog. Velocity-Matching-Point, wenn die Geschwindigkeit des Projektils und des freizusetzenden Elektrons in der inneren Schale vergleichbar sind. Die Protonenenergie E_1 des Experiments liegt mit 150keV weit unter dem Velocity-Matching-Point von 800keV für die Ionisation der Nickel- L_3 -Schale bzw. 630keV für die Ionisation der Sauerstoff-K-Schale. Lediglich bei der Nickel- M_{23} -Schale wird die maximale Ionisation schon bei 32keV erreicht. Zu kleineren Energien E_1 hin, unterhalb des Velocity-Matching-Points, fällt der Wirkungsquerschnitt rasch ab, wie Tabelle 4.1 und 4.2 zeigen. Andererseits ist in diesem Bereich, auch wenn die Einschußenergie E_1 konstant gehalten wird, der Wirkungsquerschnitt stark von der Bindungsenergie E_W des zu ionisierenden Orbitals abhängig.

Tabelle 4.1: Ionisationswirkungsquerschnitt von Nickelatomen beim direkten Stoß durch Protonen nach Gl. (4.6).

E_1 : Protoneneinschubenergie; E_W : Elektronenbindungsenergie.

E_1 [keV]	$\sigma_I(\text{Ion})$ [cm ²]					
Schale	K	L ₁	L ₂	L ₃	M ₁	M ₂₃
E_W [eV]	8333	1008	872	855	112	68
Besetzung	2	2	2	4	2	6
10	1,6E-40	1,0E-23	1,4E-24	3,6E-24	2,3E-19	7,1E-18
13	2,0E-38	1,9E-23	5,2E-24	1,3E-23	4,6E-19	8,4E-18
16	1,5E-36	3,4E-23	1,8E-23	4,3E-23	7,8E-19	9,3E-18
20	6,7E-35	5,7E-23	5,1E-23	1,2E-22	1,1E-18	9,9E-18
25	2,0E-33	9,0E-23	1,3E-22	3,1E-22	1,5E-18	1,0E-17
32	4,2E-32	1,4E-22	3,1E-22	7,0E-22	1,8E-18	1,0E-17
40	6,3E-31	1,9E-22	6,0E-22	1,4E-21	2,0E-18	9,8E-18
50	7,0E-30	2,3E-22	1,2E-21	2,7E-21	2,1E-18	9,4E-18
63	6,0E-29	2,8E-22	2,1E-21	4,8E-21	2,1E-18	8,6E-18
79	4,1E-28	4,6E-22	3,7E-21	8,2E-21	2,0E-18	7,9E-18
100	2,3E-27	1,1E-21	5,9E-21	1,3E-20	2,0E-18	7,1E-18
126	1,0E-26	2,7E-21	9,2E-21	2,0E-20	1,8E-18	6,2E-18
158	4,0E-26	5,8E-21	1,4E-20	3,0E-20	1,8E-18	5,4E-18
200	1,3E-25	1,1E-20	1,9E-20	4,2E-20	1,5E-18	4,7E-18
251	3,9E-25	1,8E-20	2,6E-20	5,6E-20	1,4E-18	4,0E-18
316	1,0E-24	2,5E-20	3,3E-20	7,1E-20	1,2E-18	3,4E-18
398	2,4E-24	3,3E-20	4,0E-20	8,5E-20	9,9E-19	2,8E-18
501	4,9E-24	4,0E-20	4,6E-20	9,6E-20	8,4E-19	2,3E-18
631	9,8E-24	4,5E-20	5,1E-20	1,0E-19	7,1E-19	1,9E-18
794	1,9E-23	4,7E-20	5,4E-20	1,1E-19	6,0E-19	1,5E-18
1000	3,6E-23	4,8E-20	5,4E-20	1,1E-19	5,0E-19	
1259	6,4E-23	4,6E-20	5,2E-20	1,1E-19	4,1E-19	
1585	1,1E-22	4,4E-20	4,9E-20	9,9E-20	3,3E-19	
1995	1,7E-22	4,0E-20	4,5E-20	9,0E-20	2,6E-19	
2512	2,6E-22	3,6E-20	4,0E-20	8,0E-20		
3162	3,6E-22	3,1E-20	3,5E-20	7,0E-20		
3981	4,9E-22	2,7E-20	3,0E-20	5,9E-20		
5012	6,1E-22	2,3E-20	2,5E-20	5,0E-20		

Tabelle 4.2: Ionisationswirkungsquerschnitt von Sauerstoffatomen beim direkten Stoß durch Protonen nach Gl. (4.6).

E_1 : Protoneneinschubenergie; E_W : Elektronenbindungsenergie.

E_1 [keV]	$\sigma_{I(\text{Ion})}$ [cm ²]			
	Schale	K	L ₁	L ₂₃
	E_W [eV]	523	24	7
	Besetzung	2	2	4
10	2,1E-23	6,0E-17	4,3E-16	
13	6,3E-23	6,9E-17	3,6E-16	
16	1,7E-22	7,5E-17	3,0E-16	
20	4,1E-22	7,7E-17	2,5E-16	
25	8,9E-22	7,6E-17	2,1E-16	
32	1,7E-21	7,2E-17	1,7E-16	
40	3,4E-21	6,7E-17	1,4E-16	
50	6,4E-21	6,1E-17	1,1E-16	
63	1,1E-20	5,3E-17	3,0E-17	
79	2,0E-20	4,6E-17		
100	3,2E-20	3,9E-17		
126	4,8E-20	3,3E-17		
158	6,9E-20	2,8E-17		
200	9,2E-20	2,3E-17		
251	1,2E-19	1,9E-17		
316	1,4E-19	1,6E-17		
398	1,6E-19	1,4E-17		
501	1,8E-19	1,1E-17		
631	1,8E-19	9,1E-18		
794	1,8E-19	7,1E-18		
1000	1,8E-19			
1259	1,6E-19			
1585	1,5E-19			
1995	1,3E-19			
2512	1,1E-19			
3162	9,7E-20			
3981	8,2E-20			
5012	6,9E-20			

4.2.2. Ionisation durch Sekundärprodukte

4.2.2.1. Schnelle Rückstoßatome

Beim Stoß zwischen Projektil und Targetatom wird dem Targetatom auch kinetische Energie E_2 übertragen. Ein Rückstoßtargetatom kann seinerseits wieder ruhende Targetatome stoßen (Substrat: Nickel, Adsorbat: Sauerstoff; $\text{Ni} \rightarrow \text{Ni}$, $\text{Ni} \rightarrow \text{O}$, $\text{O} \rightarrow \text{O}$, $\text{O} \rightarrow \text{Ni}$) und gegebenenfalls ionisieren. Dieser Prozeß wird von Kishinevskii, Kitov und Parilis [37-39] als entscheidend für die Erzeugung ioneninduzierter Auger-Elektronen angesehen. Da dieser Prozess eine ganz andere Stoßparameterabhängigkeit besitzt als die unmittelbare Coulombionisation durch das Projektil selbst, würde er die Ausbeuteprofile beeinflussen. Besonders in Anwesenheit von Adsorbaten könnte sich die Situation insofern verkomplizieren, als vom Substrat abgeschattete Adsorbate zwar nicht durch direkten Projektilstoß, wohl aber durch schnelle Rückstoßatome des Substrats ionisiert werden könnten.

Man braucht eine relativ hohe Rückstoßenergie E_2 , wenn das Rückstoßatom eine kinetische Ionisation (Molekülorbital- oder Coulombionisation) weiterer Targetatome bewirken soll. Als Anhaltspunkt für die Größe und Energieabhängigkeit des Ionisationswirkungsquerschnitts schwerer Stoßpartner kann man die Ergebnisse für symmetrische Stöße von Neon, Argon und Krypton [29 S.82] heranziehen. Die Neon-K-Schale besitzt mit 857eV fast dieselbe Bindungsenergie E_W wie die Nickel-L₃-Schale mit 855eV. Um beim Stoß $\text{Ne}^+ \rightarrow \text{Ne}$ beispielsweise einen Ionisationswirkungsquerschnitt der K-Schale von 10^{-22}cm^2 zu erreichen, muß die Projektilenergie (=Energie des Rückstoßtargetatoms E_2) für die Molekülorbitalionisation größer als 50keV sein und größer als 200keV für die Coulombionisation. Energien E_2 dieser Größenordnung können die einfallenden Protonen aber gar nicht auf die Targetatome übertragen. Der maximale Energieübertrag

$$E_{2\text{max}} = 4 E_1 m_1 m_2 / (m_1 + m_2)^2 \quad (4.7)$$

beläuft sich auf ca. 10keV für 150keV $H^+ \rightarrow Ni$ und ca. 33keV für 150keV $H^+ \rightarrow O$. Diese Grenzwerte werden jedoch nur von wenigen Rückstoßatomen erreicht. Die Verteilung der Energieüberträge E_2 kann bei Randeinschuß in guter Näherung durch die Rutherford-Formel approximiert werden (vgl. Abschnitt 6.7):

$$\frac{d\sigma}{dE_2}(E_2) = \frac{\pi \frac{Z_1^2}{m_1} \frac{Z_2^2}{m_2} e^4}{E_1 E_2^2} \quad \text{für } E_2 \leq E_{2\max}. \quad (4.8)$$

Unter Gitterführungsbedingungen ist die Anzahl der Stöße mit hohen Energieüberträgen $E_2 > 1\text{eV}$ nochmals um einen Faktor 10 geringer (vgl. Abschnitt 6.7). Setzt man für die Verteilung der Rückstoßnickelatome die Energieverteilung aus Gl. (4.8) an und schätzt den Ionisationswirkungsquerschnitt der L_3 -Schale bei Ni-Ni-Stößen mit 10^{-22}cm^2 für alle Energien $E_{L_3} < E_2 < E_{2\max}$ ab, dann kommt man auf effektive Ionisationswirkungsquerschnitte durch Rückstoßatome (RA) von $\sigma_I(\text{RA}) = 10^{-27}\text{cm}^2$. Dabei wird für den Sekundärprozeß $Ni \rightarrow Ni$ eine projizierte Flächendichte von $8,07 \cdot 10^{14}$ Nickelatome/ cm^2 veranschlagt. Als Ionisationsmechanismus in Target-Targetstößen verbleibt neben der Molekülorbital- und der Coulombionisation nur noch die statische Potentialelektronenemission, sofern das Rückstoßtargetatom beim Stoß mit dem Projektil auch in einer inneren Schale ionisiert worden ist. Damit eine solche Ionisation überhaupt möglich ist, muß das Loch im Rückstoßatom in einer energetisch tieferen Schale liegen als im zu ionisierenden Rückstoßtargetatom. Da aber die Ionisationswirkungsquerschnitte der jeweils nächstinneren Schale wesentlich geringer sind (vgl. Tabelle 4.1 und 4.2), ist auch diese Art der Ionisation im vorliegenden Experiment vernachlässigbar.

In Abschnitt 6.2 wird schließlich noch experimentell gezeigt, daß, völlig unabhängig von ihrem speziellen Mechanismus, Stöße Targetatom-Targetatom im vorliegenden Experiment keinen nennenswerten Beitrag zur Ionisation innerer Schalen liefern. Zusammenfassend kann man sagen, daß beim Beschuß mit leichten

Ionen, Anregungen durch Target-Target-Stöße für die Auger-Elektronenproduktion keine Bedeutung haben. Bei schweren Projektilen jedoch könnte dieser Mechanismus der Auger-Elektronenproduktion einen Einfluß haben [37] und auch die Positionsbestimmung von Adsorbaten beeinträchtigen.

4.2.2.2. Sekundärelektronen

Ähnlich wie auf Rückstoßtargetatome können die Projektilen auch auf Elektronen Energie übertragen. Dabei kann man Leitungsbandelektronen und schwach gebundene Elektronen in guter Näherung als ruhende freie Elektronen ansehen und mit der klassischen Rutherford-Formel [40] rechnen:

$$\left. \frac{d\sigma}{dE_e}(E_e, E_1) \right| = \frac{\pi \cdot 1^2 \cdot Z_1^2 \cdot e^4}{\frac{m_e}{m_1} E_1 E_e^2} Z_2^* \quad \text{für } E_e \leq E_{e \max} = 4 \frac{m_e}{m_1} E_1 \quad (4.9)$$

bezogen auf Z_2^* Leitungsbandelektronen

Z_1 : Kernladungszahl des Projektils;

Z_2^* : Anzahl der Leitungsbandelektronen;

m_e : Masse des Elektrons;

m_1 : Masse des Projektils;

E_1 : Energie des Projektils;

$(d\sigma/dE_e)(E_e)$: Differentieller Wirkungsquerschnitt bezüglich des Energieübertrags auf das Elektron.

Besitzt das gestoßene Elektron bereits die Geschwindigkeit v_W , so erhöht sich die maximale Energie, für die die Rutherford-Formel noch gilt, von $E_{e \max} = 2 m_e v_1^2$ auf:

$$E_{e \max} = 2 m_e v_1 (v_1 + v_W) \quad (4.10)$$

$$E_{e \max} = 4 \frac{m_e}{m_1} E_1 \left(1 + \sqrt{\frac{E_W}{E_1} \frac{m_1}{m_e}} \right). \quad (4.10a)$$

Für die sog. δ -Elektronen, die aus inneren Schalen freigesetzt werden, muß man die Bindung der Elektronen an das Atom berücksichtigen. Sera et al. [41, 42] haben in einer Plane-Wave Born Approximation mit Wasserstoffwellenfunktionen für das Targetatom die Wirkungsquerschnitte für die 1s-, 2s-, 2p-, 3s-, 3p- und 3d-Orbitale berechnet. Daraus hat Bell [43] die differentiellen Wirkungsquerschnitte bezüglich der Energie E_e der freigesetzten Elektronen für große Impulsüberträge $E_e \gg (m_e/m_1)E_1$ entwickelt:

$$\frac{d\sigma_{1s}}{dE_e}(E_e) = \frac{2^{20}\pi}{5} a_0^2 Z_1^2 \left(\frac{m_e}{m_1}\right)^4 E_0^2 \frac{E_{1s}^3 E_1^4}{(E_{1s} + E_e)^{10}} \quad (4.11)$$

Dieser Ausdruck ist identisch mit Ref. [44, 45].

$$\frac{d\sigma_{2s}}{dE_e}(E_e) = \frac{2^{17}\pi}{5} a_0^2 Z_1^2 \left(\frac{m_e}{m_1}\right)^4 E_0^2 \frac{E_{2s}^3 E_1^4}{(E_{2s} + E_e)^{10}} \quad (4.12)$$

$$\frac{d\sigma_{2p}}{dE_e}(E_e) = \frac{3 \cdot 2^{16}\pi}{1} a_0^2 Z_1^2 \left(\frac{m_e}{m_1}\right)^5 E_0^2 \frac{E_{2p}^4 E_1^5}{(E_{2p} + E_e)^{12}} \quad (4.13)$$

$$\frac{d\sigma_{3s}}{dE_e}(E_e) = \frac{2^{20}\pi}{135} a_0^2 Z_1^2 \left(\frac{m_e}{m_1}\right)^4 E_0^2 \frac{E_{3s}^3 E_1^4}{(E_{3s} + E_e)^{10}} \quad (4.14)$$

$$\frac{d\sigma_{3p}}{dE_e}(E_e) = \frac{2^{25}\pi}{486} a_0^2 Z_1^2 \left(\frac{m_e}{m_1}\right)^5 E_0^2 \frac{E_{3p}^4 E_1^5}{(E_{3p} + E_e)^{12}} \quad (4.15)$$

$$\frac{d\sigma_{3d}}{dE_e}(E_e) = \frac{2^{33}\pi}{3^9 \cdot 7} a_0^2 Z_1^2 \left(\frac{m_e}{m_1}\right)^6 E_0^2 \frac{E_{3d}^5 E_1^6}{(E_{3d} + E_e)^{14}} \quad (4.16)$$

$(d\sigma_{W_1}/dE_e)(E_e)$: Differentieller Wirkungsquerschnitt bezüglich der Energie E_e des aus der W_1 -Schale freigesetzten Elektrons. Der hier angegebene Wirkungsquerschnitt bezieht sich stets auf ein vollbesetztes Orbital.

E_{W_1} : Bindungsenergie des Elektrons in der W_1 -Schale;

E_0 : Rydbergenergie 13,6eV;

a_0 : Bohr'scher Radius 52,9pm.

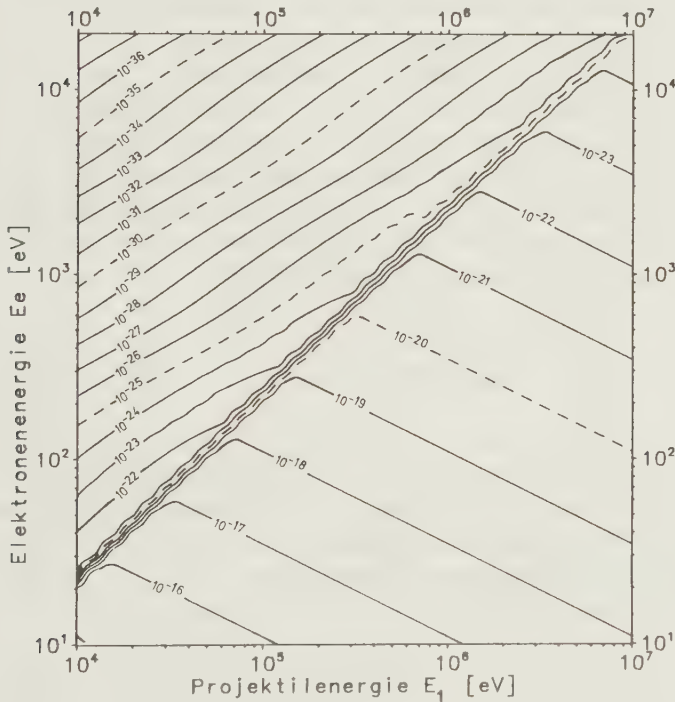


Abb. 4.6: Differentieller Wirkungsquerschnitt bezüglich der Energie E_e des durch Protonenstoß freigesetzten Elektrons nach Gl. (4.9) und (4.11)-(4.16) ($H^+ \rightarrow Ni$). Der Wirkungsquerschnitt in Einheiten von $[cm^2/eV]$ ist in Abhängigkeit der Elektronenenergie E_e und der Protoneneinschubenergie E_1 gegeben. Rechts unten: Leitungsbandelektronen; links oben: δ -Elektronen.

Die Gültigkeitsbereiche der Formeln für den differentiellen Wirkungsquerschnitt der sog. wahren Sekundärelektronen (aus dem Leitungsband) und der sog. δ -Elektronen (aus inneren Schalen) ergänzen sich gegenseitig. Für $H^+ \rightarrow Ni$ ergibt sich dabei summarisch ein differentieller Wirkungsquerschnitt $(d\sigma/dE_e)(E_e, E_1)$ wie in Abb. 4.6, wenn man $Z_2^* = 10$ ruhende freie Leitungsbandelektronen ($3d^8$ und $4s^2$) annimmt. Unter Berücksichtigung der Geschwindigkeitsverteilung der Elektronen vor dem Stoß würde sich der Übergang vom Gebiet der wahren Sekundärelektronen zum Gebiet der δ -Elektronen mehr verschmieren.

Diese durch primären Ionenstoß entstandenen schnellen Sekundärelektronen (SE) können in einem zweiten Schritt nun ihrerseits wieder innere Schalen in Targetatomen ionisieren. Zur Herleitung des effektiven Wirkungsquerschnitts $\sigma_{I(SE)}$ für den zweistufigen Ionisationsvorgang betrachtet man zunächst die Anzahl N_W der im zweiten Schritt aufgrund der Ionisation der W-Schale durch Elektronenstoß erzeugten Löcher:

$$N_W = \int_0^\infty \frac{dN_e(E_e)}{dE_e} \sigma_{IW(E)}(E_e, E_W) n_e(E_e) dE_e \quad (4.17)$$

$\sigma_{IW(E)}(E_e, E_W)$: Wirkungsquerschnitt für die Ionisation der W-Schale mit Elektronenbindungsenergie E_W durch Beschuß mit Elektronen (E) der Energie E_e .

Ref. [46, 47] geben für $\sigma_{IW(E)}(E_e, E_W)$:

$$\sigma_{IW(E)}(E_e, E_W) = \begin{cases} \frac{2\pi \gamma e^4}{E_e E_W} \ln \frac{4 \frac{E_e}{E_W}}{1,65 + 2,35(1 - \frac{E_e}{E_W})} & E_e > E_W \\ 0 & E_e \leq E_W \end{cases} \quad (4.18)$$

wobei $\gamma = 0,35$ für die K-Schale und 0,25 für die L-Schale (für die M-Schale wurde ebenfalls 0,25 veranschlagt).

$(dI_e/dE_e)(E_e)$: Anzahl der anregenden Sekundärelektronen der Energie E_e pro Energieintervall;

$n_e(E_e)$: Effektive Flächendichte der Targetatome, mit denen Sekundärelektronen der Energie E_e wechselwirken.

Dafür wird angesetzt:

$$n_e(E_e) = n_V \lambda(E_e) \quad (4.19)$$

n_V : Volumendichte der Targetatome,
z.B. für Nickel: $n_V = 91,71 \text{ nm}^{-3}$;

$\lambda(E_e)$: Inelastische mittlere freie Weglänge der Elektronen der Energie E_e .

Durch Anpassung an die empirische Meßkurve [48 S.7] folgt:

$$\lambda(E_e) = 0,17 E_e^{2/3} + 180 E_e^{-1}. \quad (4.20)$$

Die Anzahl der in der ersten Stufe erzeugten Sekundärelektronen, die in der zweiten Stufe des Prozesses für die Ionisation verantwortlich sind, beträgt:

$$\frac{dN_e}{dE_e} = N_1 \frac{d\sigma}{dE_e}(E_1, E_e) \quad (4.21)$$

N_1 : Anzahl der eingeschossenen Ionen der Energie E_1 ;

n_1 : Effektive Flächendichte der Targetatome (daraus ergibt sich die Flächendichte der Elektronen), mit denen der primäre Ionenstrahl wechselwirkt.

$(d\sigma/dE_e)(E_e, E_1)$: Differentieller Wirkungsquerschnitt;

$$\frac{d\sigma}{dE_e}(E_e, E_1) = \left\{ \begin{array}{ll} \frac{d\sigma}{dE_e} \text{ Rutherford} & E_e \leq 4 \frac{m_e}{m_1} E_1 \\ \frac{d\sigma}{dE_e} \text{ (s-Elektronen)} & E_e > 4 \frac{m_e}{m_1} E_1 \end{array} \right. \quad (4.22)$$

- E_1 : Energie des einfallenden Ions;
 E_e : Energie des anregenden Elektrons (Sekundärelektron);
 E_W : Bindungsenergie des Elektrons [49] in der W-Schale, das durch das Sekundärelektron freigesetzt wird;
 E_{W_1} : Bindungsenergie des δ -Elektrons aus der W_1 -Schale [49] ($W_1=1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d$). Der Index i läuft über alle besetzten Orbitale.

Einsetzen von (4.21) in (4.17) liefert:

$$N_W = \int_0^\infty N_1 \frac{d\sigma}{dE_e}(E_e, E_1) n_I \sigma_{I_W}(E)(E_e, E_W) n_e(E_e) dE_e. \quad (4.23)$$

Durch Vergleich mit $N_W = N_1 \sigma_{I(SE)}(E_1, E_W) n_I$ erhält man den effektiven Wirkungsquerschnitt des gesamten zweistufigen Ionisationsprozesses:

$$\sigma_{I(SE)}(E_1, E_W) = \int_0^\infty \frac{d\sigma}{dE_e}(E_e, E_W) \sigma_{I_W}(E)(E_e, E_W) n_e(E_e) dE_e \quad (4.24)$$

$\sigma_{I(SE)}(E_1, E_W)$: Wirkungsquerschnitt für die Ionisation der W-Schale durch ioneninduzierte Sekundärelektronen.

Dieser Ausdruck wurde numerisch integriert (Gauß-Legendre-Quadratur mit 64 Stützstellen für den Bereich der Rutherford-Formel $E_W < E_e < 4(m_e/m_1)E_1$, Gauß-Laguerre-Quadratur mit 64 Stützstellen für den Bereich der δ -Elektronen $4(m_e/m_1)E_1 < E_e < \infty$). Beim Beschuß von Nickel- und Sauerstoffatomen ergeben sich für den effektiven Wirkungsquerschnitt $\sigma_{I(SE)}$ die in Tabelle 4.3 und 4.4 zusammengefaßten Werte. Bei der Nickel- M_{23} -Schale macht die Ionisation durch ioneninduzierte Sekundärelektronen bis zu 20% der direkten Ionisation durch Ionen aus, während bei der L_3 -Schale der Beitrag der Sekundärelektronen unter $6 \cdot 10^{-8}$ liegt.

Tabelle 4.3: Ionisationswirkungsquerschnitt von Nickelatomen durch protoneninduzierte Sekundärelektronen nach Gl. (4.24).

E_1 : Protoneneinschußenergie; E_W : Elektronenbindungsenergie.

E_1 [keV]	$\sigma_I(SE)$ [cm ²]					
Schale	K	L ₁	L ₂	L ₃	M ₁	M ₂₃
E_W [eV]	8333	1008	872	855	112	68
Besetzung	2	2	2	4	2	6
10	1,2E-38	8,4E-33	2,1E-32	2,3E-32	3,1E-26	7,8E-25
13	3,0E-38	2,1E-32	5,2E-32	5,9E-32	8,1E-26	2,1E-24
16	7,6E-38	5,3E-32	1,3E-31	1,5E-31	2,1E-25	5,6E-24
20	1,9E-37	1,3E-31	3,3E-31	3,8E-31	5,4E-25	1,5E-23
25	4,8E-37	3,4E-31	8,4E-31	9,5E-31	1,4E-24	4,3E-23
32	1,2E-36	8,5E-31	2,1E-30	2,4E-30	3,7E-24	2,1E-21
40	3,0E-36	2,2E-30	5,4E-30	6,1E-30	9,9E-24	3,7E-19
50	7,6E-36	5,4E-30	1,4E-29	1,5E-29	2,7E-23	8,4E-19
63	1,9E-35	1,4E-29	3,4E-29	3,9E-29	4,1E-20	1,1E-18
79	4,8E-35	3,5E-29	8,8E-29	9,9E-29	1,2E-19	1,3E-18
100	1,2E-34	9,0E-29	2,2E-28	2,5E-28	1,7E-19	1,3E-18
126	3,0E-34	2,3E-28	5,8E-28	6,5E-28	2,0E-19	1,2E-18
158	7,6E-34	5,9E-28	1,5E-27	1,7E-27	2,0E-19	1,0E-18
200	1,9E-33	1,5E-27	3,8E-27	4,4E-27	2,0E-19	8,9E-19
251	4,8E-33	3,9E-27	1,0E-26	1,1E-26	1,8E-19	7,5E-19
316	1,2E-32	1,0E-26	2,6E-26	3,0E-26	1,5E-19	6,2E-19
398	3,0E-32	2,7E-26	7,0E-26	3,4E-25	1,3E-19	5,1E-19
501	7,5E-32	4,0E-24	3,9E-23	4,7E-23	1,1E-19	4,2E-19
631	1,9E-31	3,9E-23	1,0E-21	1,2E-22	9,0E-20	3,4E-19
794	4,7E-31	7,7E-23	1,6E-22	1,7E-22	7,3E-20	2,7E-19
1000	4,8E-31	1,0E-22	1,8E-22	2,0E-21	6,0E-20	2,2E-19
1259	3,0E-30	1,2E-22	1,9E-22	2,0E-22	4,8E-20	1,7E-19
1585	7,6E-30	1,2E-22	1,8E-22	1,9E-22	3,8E-20	1,4E-19
1995	1,9E-29	1,1E-22	1,7E-22	1,8E-22	3,1E-20	1,1E-19
2512	4,8E-29	9,8E-23	1,5E-22	1,5E-22	2,5E-20	8,9E-20
3162	1,2E-28	8,5E-23	1,2E-22	1,3E-22	2,0E-20	7,1E-20
3981	1,2E-26	7,2E-23	1,0E-22	1,1E-22	1,6E-20	5,6E-20
5012	2,7E-26	6,0E-23	8,6E-23	9,1E-23	1,3E-20	4,5E-20

Tabelle 4.4: Ionisationswirkungsquerschnitt von Sauerstoffatomen durch protoneninduzierte Sekundärelektronen nach Gl. (4.24).

E_1 : Protoneneinschußenergie; E_W : Elektronenbindungsenergie.

E_1 [keV]	$\sigma_I(SE)$ [cm ²]		
Schale	K	L_1	L_{23}
E_W [eV]	532	24	7
Besetzung	2	2	4
10	6,9E-30	3,5E-20	
13	1,7E-29	5,7E-18	
16	4,3E-29	2,3E-17	
20	1,1E-28	3,4E-17	
25	2,7E-28	3,8E-17	
32	6,9E-28	3,7E-17	
40	1,7E-27	3,4E-17	
50	4,3E-27	2,9E-17	
63	1,1E-26	2,4E-17	
79	2,7E-26	2,0E-17	
100	6,9E-26	1,7E-17	
126	1,7E-25	1,3E-17	
158	4,3E-25	1,1E-17	
200	1,1E-24	8,7E-18	
251	4,6E-24	7,0E-18	
316	1,0E-22	5,6E-18	
398	2,4E-22	4,5E-18	
501	3,4E-22	3,6E-18	
631	3,9E-22	2,8E-18	
794	4,0E-22	2,3E-18	
1000	3,8E-22	1,8E-18	
1259	3,4E-22	1,4E-18	
1585	3,0E-22	1,1E-18	
1995	2,5E-22	9,1E-19	
2512	2,1E-22	7,2E-19	
3162	1,7E-22	5,7E-19	
3981	1,4E-22	4,5E-19	
5012	1,2E-22	3,6E-19	

4.2.2.3. Photonen

Der Vollständigkeit halber sei auch der Beitrag diskutiert, den ioneninduzierte Photonen zur Ionisation leisten können. Dabei sind nicht die Photonen gemeint, die emittiert werden, wenn ein bereits vorhandenes Loch aufgefüllt wird. Dieser Fall wird im nächsten Abschnitt 4.2.3 zusammen mit anderen Auffüllmechanismen behandelt. Hier geht es vielmehr um Photonen, die vom Projektil selbst ausgehen, wenn das Projektil eine beschleunigte Bewegung erfährt, also um Gitterführungsstrahlung und Bremsstrahlung.

Das Führungspotential der Ionen in der Kanalmitte kann man näherungsweise als harmonisch ansehen: $V(\xi) = 1/2 C \xi^2$. In diesem Potential führt ein Projektil transversal zu seiner Fortbewegungsrichtung Schwingungen aus und emittiert dabei im nichtrelativistischen Fall Photonen der Energie

$$E_Y = \hbar \sqrt{\frac{C}{m_1}} \quad (4.25)$$

m_1 : Projektilmasse.

Bei planarer Gitterführung von Protonen zwischen Ni(100)-Ebenen gilt nach Gl. (4.50) $C=V''(d_p/2)=10,4\text{keV/nm}^2$. Diese Protonen emittieren somit Photonen der Energie $E_Y=0,63\text{eV}$.

Für das Bremsstrahlungsspektrum, das beim Stoß nichtrelativistischer Projektile mit Targetatomen entsteht, ergibt sich in der Näherung von Coulombstößen [50 S.710] folgender klassische Strahlungswirkungsquerschnitt:

$$\frac{d\sigma}{dE_Y}(E_Y) = \frac{16}{3} \frac{Z_2^2 e^2}{\hbar c E_Y} \left(\frac{Z_1^2 e^2}{m_1 c^2} \right)^2 \frac{c^2}{v_1^2} \ln \left(\frac{4 \hbar v_1 E_1}{Z_1 Z_2 e^2 E_Y} \right) \quad (4.26)$$

$(d\sigma/dE_Y)(E_Y)$: Differentieller Wirkungsquerschnitt für die Emission von Photonen bezüglich ihrer Energie E_Y ;

c : Vakuumlichtgeschwindigkeit.

Protonen mit $E_1=150\text{keV}$ liefern beim Stoß mit Nickelatomen

Photonen mit einer Energie E_γ von maximal 52keV. Jedoch beträgt der integrale Wirkungsquerschnitt für die Erzeugung von Photonen von der Minimalenergie für die Ionisation der Ni-M₂₃-Schale 68eV bis zur Maximalenergie 52keV lediglich $2 \cdot 10^{-33} \text{cm}^2$.

Weder die Gitterführungs- noch die Bremsstrahlung von 150keV-Protonen bewirken eine nennenswerte Ionisation innerer Schalen.

4.2.3. Energetische Verschiebung von Löchern

Primär erzeugte Löcher können sich durch Röntgen-, Auger- und Coster-Kronig-Übergänge zu niedrigeren Energieniveaus hin verlagern. Zur Berechnung der totalen Ionisationswahrscheinlichkeit der W-Schale I_W^{total} muß man neben den primären Löchern, wie sie durch die Ionisationswahrscheinlichkeit I_W gegeben sind, auch noch solche Löcher betrachten, die durch das Auffüllen energetisch tieferer Schalen entstehen. Eine Ausnahme stellen lediglich die KXY-Auger-Übergänge dar, denn alle Löcher in der K-Schale sind primäre Löcher, d.h. $I_K^{\text{total}} = I_K$. Bei allen anderen Schalen geht die Lochverschiebung in die Lochbilanz ein. Die gesamte Ionisationswahrscheinlichkeit der Nickel-L₃-Schale $I_{L_3}^{\text{total}}$ beträgt [51]:

$$I_{L_3}^{\text{total}} = I_K (W_{KL_1} W_{L_1 L_3} + W_{KL_1} W_{L_1 L_2} W_{L_2 L_3} + W_{KL_2} W_{L_2 L_3} + W_{KL_3}) \\ + I_{L_1} (W_{L_1 L_2} W_{L_2 L_3} + W_{L_1 L_3}) \\ + I_{L_2} W_{L_2 L_3} \\ + I_{L_3} \quad (4.27)$$

$$I_{L_3}^{\text{total}} = 0,85 I_K + 0,70 I_{L_1} + 0,10 I_{L_2} + I_{L_3} \quad (4.27a)$$

I_W^{total} : Ionisationswahrscheinlichkeit der W-Schale durch primäre Ionisation und nachfolgender Lochverschiebung;

I_W : Ionisationswahrscheinlichkeit der W-Schale allein durch primäre Ionisation;

W_{WX} : Übergangswahrscheinlichkeit $W \rightarrow X$ (Röntgen-, Auger- und

Coster-Kronig-Übergänge).

Für die M_{23} -Schale erhält man bei Nickel:

$$I_{M_{23}}^{\text{total}} = I_K W_{KM_{23}} + I_{L_1}^{\text{total}} W_{L_1 M_{23}} + I_{L_2}^{\text{total}} W_{L_2 M_{23}} + I_{L_3}^{\text{total}} W_{L_3 M_{23}} + I_{M_1}^{\text{total}} W_{M_1 M_{23}} + I_{M_{23}} \quad (4.28)$$

$$I_{M_{23}}^{\text{total}} = 1,37 I_K + 1,28 I_{L_1} + 0,88 I_{L_2} + 0,84 I_{L_3} + 0,92 I_{M_1} + I_{M_{23}} \quad (4.28a)$$

Eine Vereinfachung von Gl. (4.27a) und (4.28a) ist möglich, weil sich die primären Ionisationswahrscheinlichkeiten der K-, der L- und der M-Schalen um mehrere Größenordnungen unterscheiden (vgl. Abb. 4.5). Im Gegensatz zu den Übergängen zwischen verschiedenen Schalen liefern Coster-Kronig-Übergänge zwischen den Unterschalen einen nicht unerheblichen Beitrag. Er bewirkt einen Unterschied von bis zu 15% zwischen $I_{L_3}^{\text{total}}$ und I_{L_3} und von bis zu 35% zwischen $I_{M_{23}}^{\text{total}}$ und $I_{M_{23}}$. Die Ionisationswahrscheinlichkeitsfunktionen der betroffenen Unterschalen haben jedoch bis auf einen konstanten Faktor fast die gleiche Abhängigkeit vom Stoßparameter b (vgl. Abb. 4.5) und von der Projektilenergie E_1 . Deshalb kann man $I_{L_3}^{\text{total}}$ durch $c_{L_3} I_{L_3}$ mit einer Abweichung von weniger als 5% und $I_{M_{23}}^{\text{total}}$ durch $c_{M_{23}} I_{M_{23}}$ mit einer Abweichung von weniger als 10% annähern, wobei c_{L_3} und $c_{M_{23}}$ Konstanten sind.

4.3. Auger-Prozeß

Ein Loch in einer inneren Schale, das durch einen der diskutierten Ionisationsprozesse entstanden ist, wird durch ein Elektron mit niedrigerer Bindungsenergie aus einer äußeren Schale aufgefüllt. Die Energiedifferenz kann dann als Röntgenphoton emittiert oder als kinetische Energie auf ein weiteres Hüllenelektron übertragen werden (Auger-Prozeß). Auger-Elektronen haben deshalb charakteristische Energien. Der Auger-

Prozeß ist unabhängig davon, wie das Loch entstanden ist, ob durch Elektronen, Ionen, Photonen oder durch K-Einfang. Wird ein Loch in der W-Schale von einem Elektron aus der X-Schale aufgefüllt und dabei die überschüssige Energie auf ein Elektron der Y-Schale übertragen, so spricht man von einem WXY-Übergang. Die kinetische Energie des Auger-Elektrons beträgt dann:

$$E_{WXY} = E_W - E_X - E_Y \quad (4.29)$$

- E_W : Elektronenbindungsenergie der W-Schale im neutralen Atom;
 E_X : Elektronenbindungsenergie der X-Schale in einem Atom, dem bereits ein W-Schalen-Elektron fehlt;
 E_Y : Elektronenbindungsenergie der Y-Schale in einem Atom, dem bereits ein W-Schalen-Elektron fehlt.

Bei einer metallischen Probe mißt man im Spektrometer eine etwas andere Energie der Auger-Elektronen, wie Abb. 4.7 verdeutlicht:

$$E_{WXY,Exp} = E_W - E_X - E_Y - E_{A,Sp}. \quad (4.29a)$$

Es gibt zwar auch beim Auger-Prozeß Auswahlregeln [20 S.93, 30], die von der Elektron-Elektron-Wechselwirkung bestimmt werden. Da jedoch das emittierte Elektron jeden Bahndrehimpuls besitzen kann, sind den Auger-Übergängen im Atom keinerlei Einschränkungen auferlegt, sofern der Prozeß energetisch möglich ist, d.h. $E_{WXY} > 0$.

Die Breite der Auger-Linien wird durch die Energiebreite der beteiligten Zustände bestimmt. Man erwartet bei einem WVV-Übergang (V: Leitungsband bei Metallen) eine Linienbreite der doppelten Leitungsbandbreite E_V , z.B. bei Nickel $2E_V = 18,2 \text{ eV}$ [52]. Im Spezialfall der WWY-Übergänge, den sog. Coster-Kronig-Übergängen, trägt noch die Unschärferelation $\Delta E_e \cdot \Delta t > \hbar/2$ merklich zur Energieverbreiterung von 2 - 20 eV bei [18].

Nach der ersten Auger-Elektronenemission besitzt das Atom zwei Löcher, die kaskadenartig weitere Auger-Elektronen freisetzen können, was bei niedrigen Energien zu einem quasi-kontinuierlichen Auger-Spektrum führt.

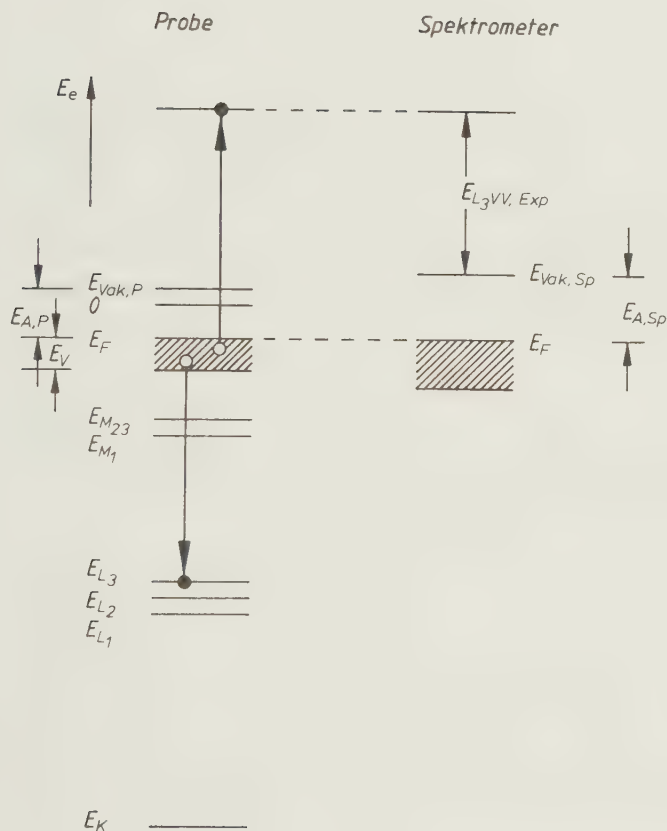


Abb. 4.7: Energieniveaudiagramm für die Spektroskopie von Auger-Elektronen an Metallen. Es ist die Elektronenenergie E_e angetragen, wobei der Energienullpunkt dem Einzelatompotential im unendlichen Abstand entspricht, d.h. einem Vakuumenergieniveau, das sich ohne Oberflächendipolschicht ergeben würde. E_A : Austrittsarbeit des Spektrometers (Sp) bzw. der Probe (P), $E_{A,Ni(110)}=5,04\text{eV}$ [24]; E_{vak} : Vakuumenergieniveau; E_F : Fermi-Kante; E_V : Leitungsbandbreite, bei Nickel $E_V=9,1\text{eV}$ [52]; $E_{L_3VV,Exp}$: Mit dem Spektrometer meßbare Energie am Beispiel des L_3VV -Auger-Elektrons; Schalenenergien bei Nickel: $E_K=8333\text{eV}$, $E_{L_1}=1008\text{eV}$, $E_{L_2}=872\text{eV}$, $E_{L_3}=855\text{eV}$, $E_{M_1}=112\text{eV}$, $E_{M_{23}}=68\text{eV}$.

4.4. Auger-Ausbeute und Fluoreszenzausbeute

Die nach dem Verschieben sich ergebenden Löcher können über zwei konkurrierende Prozesse, die Photonenemission oder die Auger-Elektronenemission, abgeregt werden. Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Loch in der W-Schale durch ein Elektron in einem strahlenden Übergang aufgefüllt wird, ist die Fluoreszenzausbeute ω_W . Die dazu komplementäre Auger-Ausbeute beträgt:

$$P_{AW} = 1 - \omega_W. \quad (4.30)$$

Häufig gibt es mehrere mögliche Auger-Prozesse, um die ionisierte W-Schale zu füllen. Der Anteil einer speziellen WXY-Auger-Linie an der Gesamtheit der möglichen W.-Linien wird mit η_{WXY} bezeichnet (vgl. Tabelle 4.5).

$$\begin{aligned} P_{AWXY} &= \eta_{WXY} P_{AW} \\ &= \eta_{WXY} (1 - \omega_W) \end{aligned} \quad (4.31)$$

P_{AWXY} : Wahrscheinlichkeit, daß ein Loch in der W-Schale durch einen WXY-Auger-Übergang aufgefüllt wird;

P_{AW} : Wahrscheinlichkeit, daß ein Loch in der W-Schale durch irgendeinen Auger-Übergang aufgefüllt wird.

Tabelle 4.5:

$L_{3..}$ - und $M_{23..}$ -Auger-Linien bei Nickel [49]:

Linie WXY	η_{WXY}
$L_3M_1M_1$	0,017
$L_3M_1M_{23}$	0,052
$L_3M_{23}M_{23}$	0,159
L_3M_1V	0,086
$L_3M_{23}V$	0,276
L_3VV	0,410
$M_{23}VV$	1,000

K.-Auger-Linien bei Sauerstoff [49]:

Linie WXY	η_{WXY}
KL ₁ L ₁	0,143
KL ₁ L ₂₃	0,286
KL ₂₃ L ₂₃	0,571

Im Energiebereich der Auger-Elektronen $E_{WXY} < 1000 \text{ eV}$ ist die Auger-Ausbeute P_{AW} nahezu 1, da die Fluoreszenzausbeute ω_W sehr klein wird. Die Auger-Ausbeute P_{AK} der K-Schale läßt sich durch die semiempirische Formel von Burhop [53] beschreiben:

$$P_{AK} = 1 - \omega_K$$

$$= [1 + (-6,4 \cdot 10^{-2} + 3,4 \cdot 10^{-2} Z_2 - 1,03 \cdot 10^{-6} Z_2^3)^4]^{-1}. \quad (4.32)$$

Die Situation der anderen Schalen ist komplizierter, doch hängt die Auger-Ausbeute im wesentlichen von der Elektronenbindungsenergie E_W ab [18, 48 S.7, 51]. Die Wahrscheinlichkeit für die Erzeugung von WXY-Auger-Elektronen

$$P_{AWXY} I_W = \eta_{WXY} (1 - \omega_W) I_W \approx \eta_{WXY} I_W \quad (4.33)$$

wird also von der Ionisationswahrscheinlichkeit der W-Schale, I_W , geprägt.

4.5. Elektronentransport

Elektronen, die im Festkörper in Auger- oder Ionisationsprozessen freigesetzt werden, besitzen eine kinetische Energie, die viel höher als die Fermi-Energie ist. Diese sog. heißen Elektronen bilden zusammen mit dem ungestörten Festkörper keinen Eigenzustand. Deshalb können heiße Elektronen den Festkörper nicht als Blochwellen durchdringen. Sie sind vielmehr inelastischen und auch elastischen Wechselwirkungen unterworfen. Diese

Elektronen müssen aus dem Inneren des Kristalls herauskommen und die Austrittsarbeitsschwelle überwinden, um in den Elektronenenergieanalysator eintreten zu können. Für den Transport angeregter heißer Elektronen ist aber nicht die gesamte Elektronenreichweite von Bedeutung, sondern die mittlere freie Weglänge, bevor das Elektron inelastisch gestreut wird. Nach der inelastischen Streuung existiert das Auger-Elektron immer noch, jedoch mit verringerter Energie. Es erscheint dann nur noch im Untergrund des Energiespektrums emittierter Elektronen und trägt nicht mehr zur relevanten Auger-Linienstärke bei. Inelastische Streuprozesse mit Teilchen-Loch-Anregung und Plasmaanregung bestimmen die Elektronenaustrittslänge [54-57]. Der elastische Streuwirkungsquerschnitt ist in den meisten Materialien für Elektronenenergien über 200eV wesentlich kleiner als der inelastische. Man kann deshalb davon ausgehen, daß Auger-Elektronen, die bei einer Atomabregung emittiert werden, sich geradlinig bewegen, bis sie entweder durch die Oberfläche austreten oder bis sie inelastisch gestreut werden [57]. Wenn die obige Bedingung nicht erfüllt ist, wird die mittlere Austrittslänge eine Funktion sowohl der elastischen als auch der inelastischen mittleren freien Weglänge [58, 59]. Ein Elektron, das in einem Auger-Prozeß in der Tiefe y erzeugt worden ist, kann mit der Wahrscheinlichkeit dP_E den Kristall ohne inelastische Streuung verlassen und unter dem Winkel α bezüglich der Oberflächennormalen in ein Raumwinkelement $d\Omega$ gelangen:

$$dP_E(y) = \exp\left| \frac{-y}{\lambda(E_E) \cos\alpha} \right| \frac{d\Omega}{4\pi}. \quad (4.34)$$

Hierbei ist $\lambda(E_E)$ die mittlere Austrittslänge eines Elektrons der Energie $E_E \gg E_F$. Wenn die Elektronen von einem CMA mit einem polaren Eintrittswinkel α von $\alpha_0 \pm \Delta\alpha = 42^\circ \pm 6^\circ$ erfaßt werden, resultiert eine Austrittswahrscheinlichkeit von:

$$P_E(y) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_{\alpha_0 - \Delta\alpha/2}^{\alpha_0 + \Delta\alpha/2} \exp\left(\frac{-y}{\lambda(E_e) \cos\alpha_0}\right) \sin\alpha \, d\alpha \, d\beta \quad (4.35)$$

$$\approx \frac{\Delta\alpha}{2} \sin\alpha_0 \exp\left(\frac{-y}{\lambda(E_e) \cos\alpha_0}\right) \quad (4.35a)$$

$$= 0,07 \exp\left(\frac{-1,35 y}{\lambda(E_e)}\right). \quad (4.35b)$$

4.6. Konzept zur analytischen Berechnung der Auger-Elektronenausbeuteprofile

4.6.1. Ausbeuteprofile bei starrem Gitter

Faßt man zusammen, was bisher in Abschnitt 4 angesprochen wurde, so kann man für eine bestimmte Flußdichteverteilung der Ionen die Auger-Elektronenausbeute angeben. Diese Ausbeute beträgt bei Beschuß eines perfekten starren Kristallgitters mit Ionen der Energie $E_1^{(0)}$ [60]:

$$Y_{WXY}(E_1^{(0)}, \Phi, \Theta) = \int \iiint_{y \times E_1} \frac{dF}{dE_1}(\vec{r}, E_1; E_1^{(0)}, \Phi, \Theta) I_W(E_1, b(\vec{r})) P_{A_{WXY}} P_E(y) dE_1 \, dx \, dy \quad (4.36)$$

Y_{WXY} : Ausbeute detektierter WXY-Auger-Elektronen;

$F(\vec{r}; E_1^{(0)}, \Phi, \Theta)$: Ionenflußdichte;

$(dF/dE_1)(\vec{r}, E_1; E_1^{(0)}, \Phi, \Theta)$: Differentielle Ionenflußdichte bezüglich der Energie der Ionen;

$I_W(E_1, b(\vec{r}))$: Ionisationswahrscheinlichkeit der W-Schale durch Stoß mit einem Ion der Energie E_1 und dem Stoßparameter $b(\vec{r})$;

$P_{A_{WXY}}$: Wahrscheinlichkeit, das Loch in der W-Schale durch einen WXY-Auger-Übergang aufzufüllen;

$P_E(y)$: Austrittswahrscheinlichkeit eines Auger-Elektrons, das in der Tiefe y erzeugt wurde;

$E_1^{(0)}$: Einschussenergie des Projektils;

E_1 : Augenblickliche kinetische Energie des Projektils;

Φ, Θ : Einschusswinkel, vgl. Abb. 4.1;

$\vec{r}=(x,y,z)$: Koordinaten des Projektils relativ zum Kristallgitter;

$d_p(hkl)$: Abstand der Transversalebenebenen;

i : Index der Transversalebenebenen, wobei $z = i \cdot d_p(hkl)$;

$b(\vec{r})$: Stoßparameter des Projektils.

Für feste Ioneneinschussbedingungen, Φ und $E_1^{(0)} = \text{const.}$, vereinfacht sich Gl. (4.36) zu:

$$Y_{WXY}(\Theta) = \sum_i \int_y \int_{E_1} \left[\frac{dF}{dE_1}(\vec{r}, E_1; \Theta) I_W(E_1, b(\vec{r})) P_{A_{WXY}} P_E(y) dE_1 dx dy \right] \quad (4.37)$$

Will man allein den Produktionsprozeß der Auger-Elektronen ohne den Austrittsmechanismus studieren, so ist es zweckmäßig eine Auger-Elektronenproduktion $\hat{Y}$ zu definieren:

$$\hat{Y}_{WXY}(\Theta) = \sum_i \int_y \int_{E_1} \left[\frac{dF}{dE_1}(\vec{r}, E_1; \Theta) I_W(E_1, b(\vec{r})) P_{A_{WXY}} dE_1 dx dy \right] \quad (4.38)$$

Zur Beurteilung der Oberflächensensitivität der vorgestellten Methode muß man Beiträge der einzelnen Atomlagen zur gesamten Auger-Elektronenausbeute Y kennen. Dazu untersucht man die Tiefenabhängigkeit der differentiellen Auger-Elektronenausbeute $(dY/dy)(\Theta, y)$ und der differentiellen Auger-Elektronenproduktion $(d\hat{Y}/dy)(\Theta, y)$:

$$\frac{dY_{WXY}}{dy}(\Theta, y) = \sum_i \int_{E_1} \left[\frac{dF}{dE_1}(\vec{r}, E_1; \Theta) I_W(E_1, b(\vec{r})) P_{A_{WXY}} P_E(y) dE_1 dx \right] \quad (4.39)$$

$$\frac{d\hat{Y}_{WXY}}{dy}(\Theta, Y) = \sum_i \int \int_{E_1} \frac{dF}{dE_1}(\vec{r}, E_1; \Theta) I_W(E_1, b(\vec{r})) P_{A_{WXY}} dE_1 d\vec{r}. \quad (4.40)$$

4.6.2. Ausbeuteprofile bei thermischen Gitterschwingungen

Die Gleichungen (4.36) und (4.37) basieren auf der Annahme eines starren Gitters, in dem die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Targetatome eine δ -förmige Verteilung ist. Im realen Gitter hingegen sorgen thermische Gitterschwingungen für eine gaußförmige Verteilung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Targetatome [61]. Diese thermische Verteilung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Targetatome $A(\vec{r}_0)$ beeinflusst auch die Auger-Elektronenausbeute $Y(\Theta)$, da in die Ionisationswahrscheinlichkeitsfunktion der Stoßparameter zwischen Projektil und thermisch ausgelenktem Targetatom eingeht. Die Wahrscheinlichkeit, ein Targetatom, dessen Position von der Aufenthaltswahrscheinlichkeit $A(\vec{r}_0)$ beschrieben wird, durch den Stoß eines Projektils am Ort $\vec{r}$ zu ionisieren, ist durch die Faltung der Targetatom-Aufenthaltswahrscheinlichkeit mit der Ionisationswahrscheinlichkeit gegeben:

$$I^*(E_1, \vec{r}) = \int_{\vec{r}_0} I(E_1, b(\vec{r} - \vec{r}_0)) A(\vec{r}_0) d\vec{r}_0. \quad (4.41)$$

$I^*(E_1, \vec{r})$ kann man als thermisch verbreiterte Ionisationswahrscheinlichkeit bezüglich der Koordinaten des starren Gitters ansehen. Man braucht deshalb in Gl. (4.36) und (4.37) nur $I(E_1, b(\vec{r}))$ durch $I^*(E_1, \vec{r})$ zu ersetzen, wenn man die thermischen Schwingungen berücksichtigen will.

4.7. Arbeitsparameter für die Auger-Elektronenemission bei Oberflächen-Ionengitterführung

In den Abschnitten 4.2.1, 4.2.2.2 und 4.6 sind bereits Wirkungsquerschnitte der Ionisation durch Ionen sowie durch Ioneninduzierte Sekundärelektronen und der Einfluß der Stoßparameterabhängigkeit der Ionisationswahrscheinlichkeit erläutert worden. Diese und noch weitere für die Ausbeuteprofile wichtige Größen sollen herangezogen werden, um die für das Experiment optimalen Arbeitsparameter (Kernladungszahl des Projektils, Einschußenergie, Einschußwinkel) festzulegen. Die Auswahl geeigneter Auger-Linien wird dadurch eingegrenzt. Daraus ergibt sich auch eine Einschränkung möglicher Substrate und Adsorbate.

Um zu funktionalen Zusammenhängen zu gelangen, die sich noch graphisch darstellen lassen und dennoch die vielschichtigen Einflüsse in einem Bild erkennen lassen, müssen an den physikalischen Beziehungen Vereinfachungen vorgenommen werden.

4.7.1. Neutralisation

Die Ionisation der Targetatome (Substrat und Adsorbat) läßt sich als direkte Coulombionisation durch eine punktförmige einfallende Ladung beschreiben, sofern das Projektil schnell genug ist, daß es keine Elektronen von Targetatomen übernimmt. Ein Elektron wird von einem positivem Ion eingefangen, wenn die Ionengeschwindigkeit v_1 geringer als die Orbitalgeschwindigkeit des ans Projektil gebundenen Elektrons ist. Bohr [62, 63] gab als effektive kritische Geschwindigkeit v_C an:

$$v_C = Q_1 v_0 Z_1^{-1/3} \quad (4.42)$$

Q_1 : Ladungszustand des Projektils;

Z_1 : Kernladungszahl des Projektils;

v_0 : Bohr'sche Geschwindigkeit $2,2 \cdot 10^8 \text{ cm/s}$.

Soll Elektroneneinfang bei nackten Projektilen, $Q_1=Z_1$, vermieden werden, so muß ihre Energie E_1 größer als die kritische Energie E_C sein:

$$E_C = (m_1/m_e) E_O Z_1^{4/3} \quad (4.42a)$$

m_1 : Masse des Projektils;

m_e : Masse des Elektrons;

E_O : Rydbergenergie 13,6eV.

Brandt [26 S.268] nimmt an, daß Protonen in Metallen keine stabilen Elektronenorbitale binden, nicht einmal im Ruhezustand. Demnach wäre bei Beschuß von Metallen mit langsamen Protonen lediglich an der Oberfläche mit Neutralisation zu rechnen.

4.7.2. Adiabatische Länge und kritischer Gitterführungsabstand

Damit Auger-Ausbeuteprofile stark moduliert sind, d.h. ausgeprägte Minima aufweisen, soll sich der geführte Ionenfluß möglichst wenig mit der Ionisationswahrscheinlichkeitsfunktion überlappen. Die Ausdehnung der Ionisationswahrscheinlichkeitsfunktion läßt sich durch die sog. adiabatische Länge r_{ad} beschreiben. Diese adiabatische Länge folgt aus der Adiabasiebedingung, wenn man die Coulombionisationswahrscheinlichkeit in zeitabhängiger Störungsrechnung (SCA) berechnet [50 S.621, 64]:

$$r_{ad} = \frac{\hbar v_1}{E_W} = \sqrt{\frac{2 \hbar^2 E_1}{m_1 E_W^2}} \quad (4.43)$$

E_W : Bindungsenergie des freizusetzenden Elektrons.

Der minimale Abstand r_C der längs der $[hkl]$ -Richtung geführten Projektile von den Atomketten beträgt [5, 65]:

$$r_c = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2 d_a[hkl]}{E_1} \right)^{1/2} f(Z_1, Z_2, E_1, d_a[hkl]) \quad (4.44)$$

mit

$$f = 1 + 0,2 \log \left(\frac{0,2 E_1 a_{TF}^2}{Z_1 Z_2 e^2 d_a[hkl]} \right) \quad (4.45)$$

$d_a[hkl]$: Abstand der Atome in der $[hkl]$ -Kette;

a_{TF} : Thomas-Fermi-Abschirmlänge.

Die Funktion f ist etwa gleich 1 und hängt nur in geringem Maße von den Variablen Z_1 , Z_2 , E_1 und $d_a[hkl]$ ab.

Um ein tiefes Ausbeuteminimum ($Y_{\min} \ll Y_{\text{random}}$) zu erreichen, muß die Bedingung $r_{ad} < r_c$, d.h.

$$\sqrt{\frac{2 \hbar^2 E_1}{m_1 E_W^2}} < \sqrt{\frac{Z_1 Z_2 e^2 d_a[hkl]}{E_1}} \quad (4.46)$$

erfüllt sein.

Der Atomabstand $d_a[hkl]$ hängt natürlich vom Kristallgitter und der Einschubrichtung ab. In der folgenden Abschätzung wird jedoch eine niederindizierte Einschubrichtung zugrunde gelegt und $d_a[hkl]$ durch den Abstand nächster Nachbarn ersetzt. Für den Abstand nächster Nachbarn wird ein mittlerer Wert von 0,295nm angenommen. Beschränkt man sich ferner auf einfallende Protonen, d.h. $Z_1=1$ und $m_1=1A.E.$, so reduziert sich die Bedingung (4.46) auf:

$$E_W > 1,4 \cdot 10^{-2} E_1 Z_2^{-1/2}. \quad (4.47)$$

In einem E_W - E_1 -Diagramm (Abb. 4.8) bedeutet diese Beziehung, daß das Gebiet unterhalb der schräg verlaufenden Geraden (Z_2 ist hier ein Parameter) keine deutlich modulierten Ausbeuteprofile verspricht. Für das Experiment bieten sich zwei Wege an, diesen

Bereich zu verlassen: Schalen mit höherer Elektronenbindungsenergie E_W ionisieren, d.h. höherenergetische Auger-Linien anregen, oder die Projektilenergie E_1 vermindern.

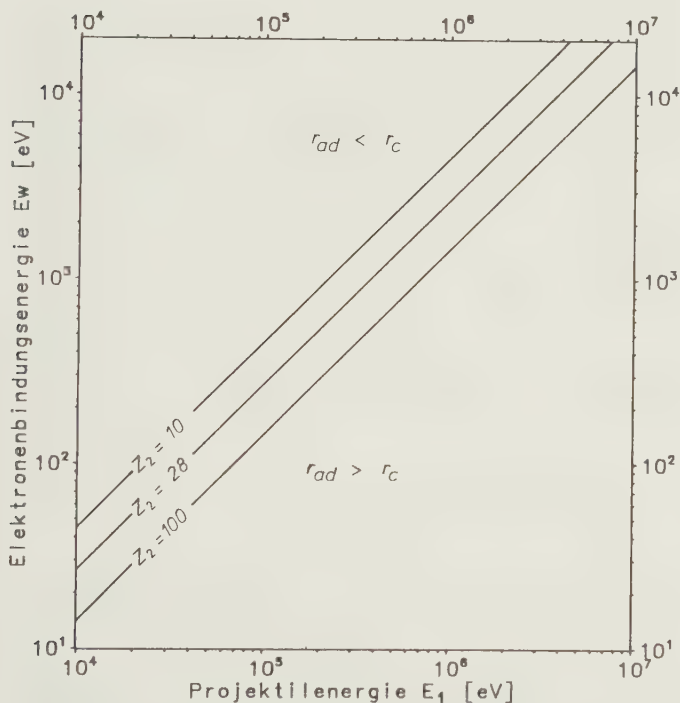


Abb. 4.8: Linien der Gleichheit von adiabatischer Länge r_{ad} und kritischem Gitterführungsabstand r_c im E_W - E_1 -Diagramm für verschiedene Targetatome Z_2 . Das Projektil ist ein Proton.

4.7.3. Ionisation durch Sekundärelektronen

Um ein tiefes Minimum der Auger-Elektronenausbeute zu erhalten ($Y_{\min} \ll Y_{\text{random}}$); ist außer der Bedingung $r_{\text{ad}} < r_C$ noch eine weitere Anforderung zu erfüllen. So muß die direkte Coulombionisation durch das Projektil selbst alle anderen Ionisationsmechanismen deutlich übertreffen, die keine ähnlich starke Stoßparameterabhängigkeit wie die Coulombanregung besitzen. Insbesondere die Ionisation durch ioneninduzierte Sekundärelektronen (vgl. Abschnitt 4.2.2.2) könnte das Ausbeuteprofil verschmieren. Für ein stark moduliertes Ausbeuteprofil ist deshalb zusätzlich nötig:

$$\sigma_{\text{I(ion)}}(E_1, E_W) \gg \sigma_{\text{I(SE)}}(E_1, E_W).$$

Den Ausdruck (4.6) für den Wirkungsquerschnitt $\sigma_{\text{I(ion)}}$ kann man durch $\mu_{n1}=1$ und $E_W = E_0 Z_{2\text{eff}}^2/n^2$ vereinfachen zu:

$$\sigma_{\text{I(ion)}}(E_1, E_W) \approx \frac{10^{-24} E_0}{E_W^2} \frac{2j+1}{2l+1} \frac{1}{n^4} F_{n1} \left(271 \sqrt{\frac{E_W}{E_1}} \right). \quad (4.48)$$

Der Wirkungsquerschnitt hängt zwar von den Quantenzahlen n, l, j der ionisierten Schale ab, doch die Wirkungsquerschnitte verschiedener Schalen mit vergleichbaren Elektronenbindungsenergien E_W unterscheiden sich in fast allen Fällen um weniger als einen Faktor 10. Durch Mittelung über alle Elemente von Wasserstoff $Z_2=1$ bis Xenon $Z_2=54$ und über alle K-, L- und M-Schalen wurde ein mittlerer Wirkungsquerschnitt für die Coulombionisation $\sigma_{\text{I(ion)}}$ berechnet, der nur noch von der Elektronenbindungsenergie E_W und der Projektilenergie E_1 abhängt (Abb. 4.9).

Analog läßt sich auch $\sigma_{\text{I(SE)}}(E_1, E_W)$ approximieren und näherungsweise durch die zwei Variablen E_1 und E_W beschreiben (Abb. 4.10). Abb. 4.11 zeigt das Verhältnis $\sigma_{\text{I(SE)}}$ zu $\sigma_{\text{I(ion)}}$ in einem weiten Bereich von Projektilenergien E_1 und Elektronenbindungsenergien E_W . Um ausgeprägte Ausbeuteminima mit

$Y_{\min} \leq 0,1 Y_{\text{random}}$ erwarten zu können, sollte das angetragene Verhältnis der Wirkungsquerschnitte deutlich unter 0,1 liegen.

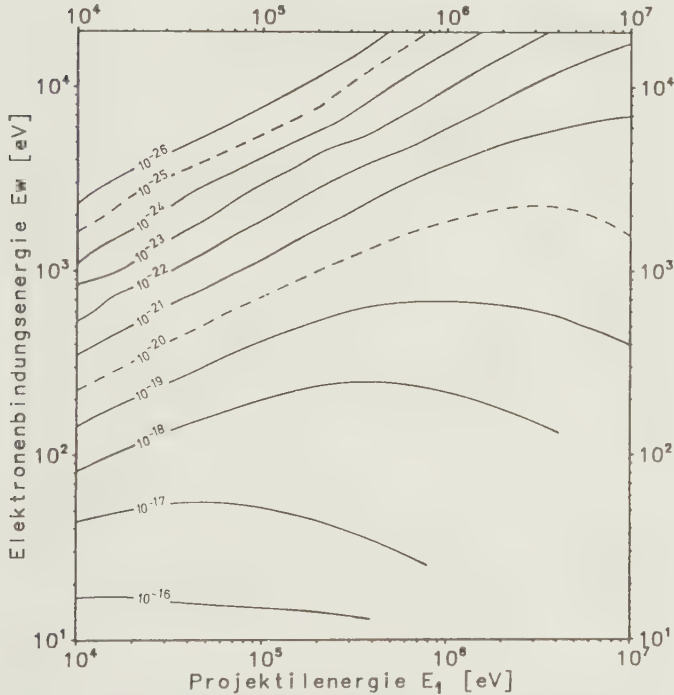


Abb. 4.9: Ionisationswirkungsquerschnitt $\sigma_{I(\text{Ion})}$ in $[\text{cm}^2]$ beim direkten Protonenstoß in Abhängigkeit von der Elektronenbindungsenergie E_W des ionisierten Orbitals und der Protoneneinschubenergie E_1 . Die Werte beruhen auf gemittelten Wirkungsquerschnitten nach Gl. (4.48). Die Bereiche links oben und rechts unten liegen außerhalb des Definitionsbereichs.

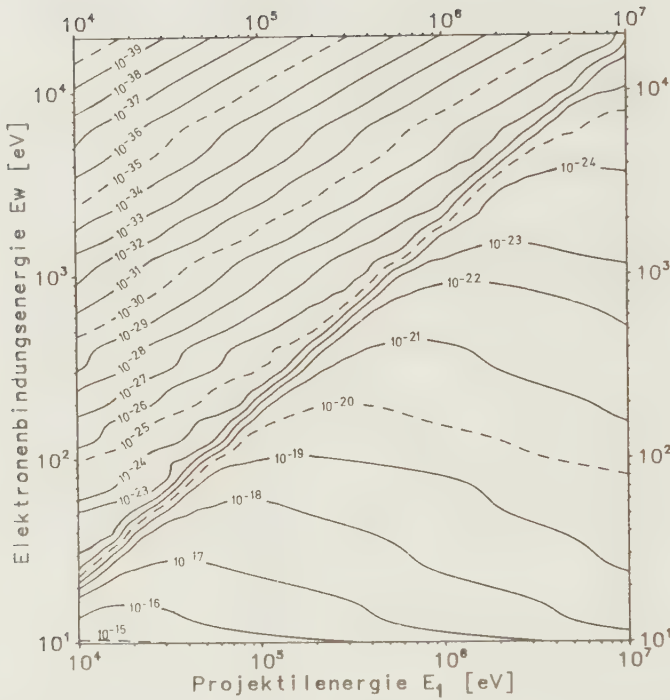


Abb. 4.10: Wirkungsquerschnitt $\sigma_{I(SE)}$ in $[cm^2]$ für die Ionisation durch protoneninduzierte Sekundärelektronen in Abhängigkeit von der Elektronenbindungsenergie E_W des ionisierten Orbitals und der Protoneneinschubenergie E_1 . Die Werte beruhen auf gemittelten Wirkungsquerschnitten nach Gl. (4.24). Man unterscheidet nach der Herkunft der Sekundärelektronen zwei Bereiche: Rechts unten Leitungsbandelektronen und links oben δ -Elektronen.

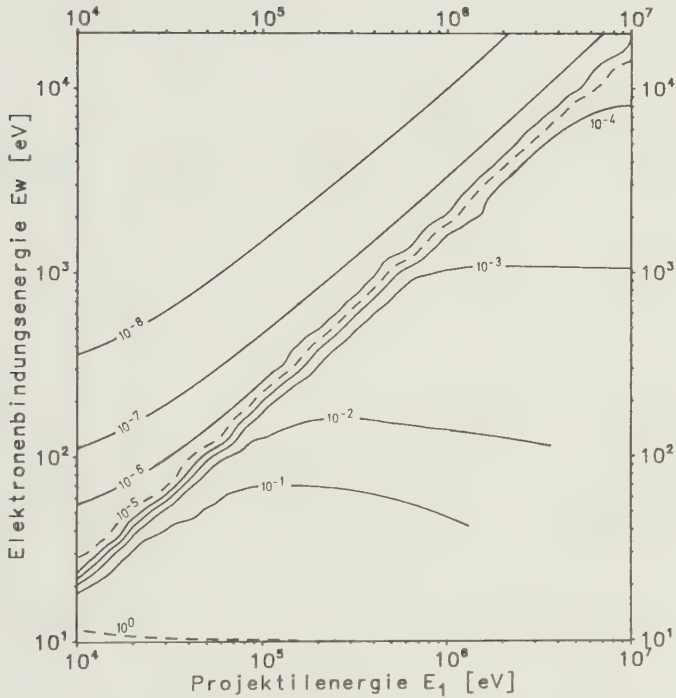


Abb. 4.11: Verhältnis der Ionisationswirkungsquerschnitte $\sigma_I(\text{SE})/\sigma_I(\text{Ion})$ im E_W - E_1 -Diagramm. Die Projektile sind Protonen. Die Bereiche links oben und rechts unten liegen außerhalb des Definitionsbereichs.

4.7.4. Wirkungsquerschnitt der direkten Coulombionisation, Auger-Ausbeute

Da man den Wirkungsquerschnitt $\sigma_I(\text{Ion})$ auch vor dem Hintergrund eines für die Messung ausreichenden Signal-Rauschverhältnisses sehen muß, ergibt sich neben den oben behandelten

Einschränkungen auch die Forderung, im Rahmen dieser Restriktionen den absoluten Wert des Wirkungsquerschnitts zu optimieren. Wie man aus Abb. 4.10 entnimmt, sind dies meist einander entgegengerichtete Forderungen.

Für die Auger-Elektronenausbeute spielt außer dem Ionisationswirkungsquerschnitt $\sigma_I(\text{Ion})$ auch noch die Auger-Ausbeute P_A eine Rolle. Die Auger-Ausbeute nimmt erst für $E_W > 3000\text{eV}$ merklich zugunsten der Röntgenausbeute ab (vgl. Abschnitt 4.4).

4.7.5. Mittlere Austrittslänge der Elektronen

Die mittlere Austrittslänge $\lambda(E_e)$ der Auger-Elektronen bestimmt zusammen mit der selektiven Anregung durch streifenden Einschub die Oberflächensensitivität der vorgestellten Methode. Im Energiebereich zwischen 10eV und 1300eV beträgt die mittlere Austrittslänge λ weniger als 2nm , bei 60eV sogar nur $0,4\text{nm}$ [48 S.7]. Dies ist bei großen Einschubwinkeln $\Phi > 1^\circ$ von Bedeutung für die Oberflächensensitivität. Bei axialer Oberflächen-Ionengitterführung wird jedoch die Oberflächensensitivität durch die Anregung bestimmt, die auf die obersten Atomlagen beschränkt ist (vgl. Abschnitt 6.4.1). Die mittlere Austrittslänge ist dann nur noch von untergeordneter Bedeutung.

4.7.6. Festlegung der experimentellen Rahmenbedingungen

In Abb. 4.12 sind alle Einschränkungen, die bei der Verwendung von Protonen als Projektile zu beachten sind, in einem Diagramm zusammengefaßt. Man entnimmt diesem Diagramm, daß sich bei einem Nickelsubstrat für Bindungsenergien E_W zwischen 80eV und 1300eV (die Grenze 1300eV ist nicht als strenge Restriktion zu sehen) Protoneneinschubenergien E_1

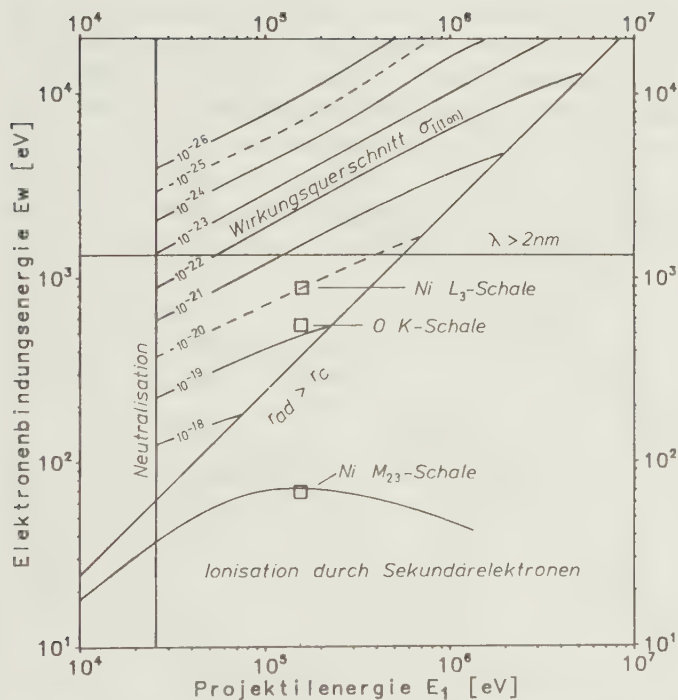


Abb. 4.12: Zusammenstellung aller Einschränkungen des E_W - E_1 -Arbeitsbereiches für Auger-Elektronenspektroskopie bei Oberflächen-Ionengitterführung. Geeignet ist der dreieckige Bereich zwischen der Einschränkung durch die Neutralisation und der Einschränkung $r_{ad} < r_C$. Die eingezeichnete Gerade $r_{ad} = r_C$ gilt für $Z_2 = 28$. Die Ionisationswirkungsquerschnitte $\sigma_{I(Ion)}$ nehmen nach oben links ab.

finden, die die Methode ioneninduzierte Auger-Elektronenspektroskopie mit Oberflächen-Ionengitterführung ermöglichen. Die größte Variationsbreite der Elektronenbindungsenergie E_W ergibt sich bei niedrigen Projektilenergien. Überträgt man für die Projektilenergie $E_1 = 25$ keV die Einschränkungen $\lambda < 2nm$ und $r_{ad} < r_C$ in eine Darstellung $E_W(Z_2)$ (Abb. 4.13), so erkennt man, daß

diese Methode auf alle Elemente anwendbar erscheint, außer auf Wasserstoff, Helium, Lithium und Beryllium. Bei Wasserstoff und Helium existiert ohnehin kein Auger-Übergang. Beryllium scheidet nur als Substrat aus; die Verwendung als Adsorbat bleibt davon unberührt.

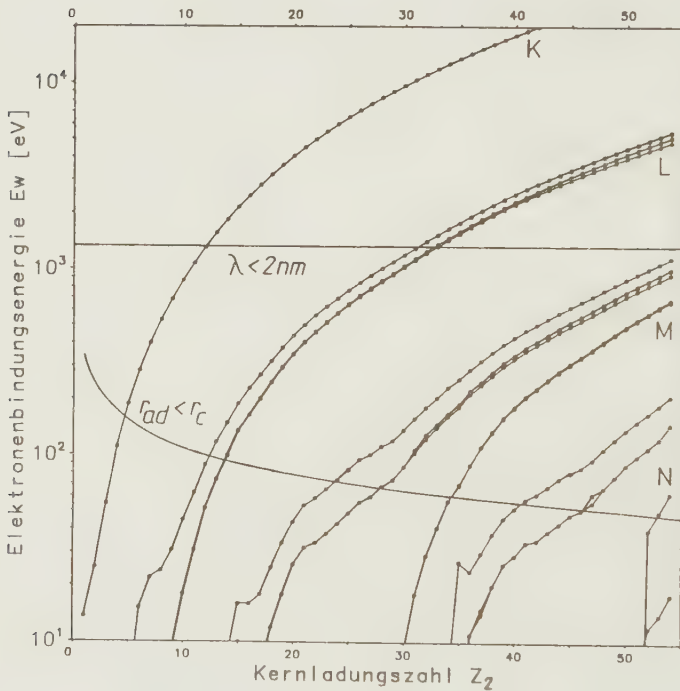


Abb. 4.13: Diagramm zur Auswahl von Auger-Linien für die Auger-Elektronenspektroskopie bei Oberflächen-Ionengitterführung in Abhängigkeit vom Targetatom Z_2 . Geeignet sind Linien im Bereich der Elektronenbindungsenergien zwischen den Einschränkungen $\lambda < 2nm$ und $r_{ad} < r_c$.

4.7.7. Einschußwinkel

Damit die Untersuchung oberflächensensitiv ist, sind die Projektile so einzuschießen, daß die Bedingung der axialen Oberflächen-Ionengitterführung erfüllt ist. Dies erreicht man durch die Wahl eines kleinen Einschußwinkels Φ . Bei Vergrößerung des Winkels Φ und parallelem Ioneneinfall zu den niederindizierten Ebenen kann ein beträchtlicher Teil der Projektile zwischen den Ebenen geführt werden. Der Übergang von axialer Gitterführung zur planaren Gitterführung wird vom Winkel Φ bestimmt. Planare Gitterführung kann sich für Winkel $\Phi > \Phi_C$ entwickeln, wobei [66-68]

$$\Phi_C = \sqrt{\frac{d_r^2 V''(d_p/2)}{8 E_1}} \quad (4.49)$$

und

$$V''(d_p/2) = 2 \frac{2\pi Z_1 Z_2 e^2}{d_r d_a a_{TF}} \sum_{i=1}^3 \alpha_i \beta_i \exp\left(-\frac{\beta_i d_p}{2 a_{TF}}\right) \quad (4.50)$$

$V''(d_p/2)$: Zweite Ableitung des planaren Potentials in der Mitte zwischen zwei Ebenen;

d_p : Abstand der Ebenen;

d_r : Abstand der Ketten in dieser Ebene;

d_a : Abstand der Atome in dieser Kette;

$\alpha_i = (0,10; 0,55; 0,35)$;

$\beta_i = (6,00; 1,20; 0,30)$.

Der Einschußwinkel Φ sollte möglichst dicht am kritischen Winkel Φ_C liegen, damit eine hohe Auger-Elektronenausbeute erzielt wird (vgl. dazu die Messung in Abschnitt 6.3 und 6.4), jedoch Φ_C nicht überschreiten.

5. Grundlagen der Computersimulationen

Die theoretischen Betrachtungen in Abschnitt 4 erlauben es im Prinzip, mit Hilfe der Gleichungen (4.36) und (4.41) die Einschußwinkelabhängigkeit der Auger-Elektronenausbeute zu berechnen. Dazu braucht man jedoch die differentielle Flußdichteverteilung der Projektile im oberflächennahen Bereich des Festkörpers. Ein Algorithmus zur Bestimmung der differentiellen Ionenflußdichteverteilung $(dF/dE_1)(\vec{r}, E_1; E_1^{(0)}, \Phi, \Theta)$ im Kristallgitter existiert bis jetzt noch nicht. Im Vergleich zur Gitterführung im Kristallinneren wäre eine analytisch geschlossene Behandlung der Oberflächen-Ionengitterführung noch aufwendiger, da durch die Oberfläche die Translationssymmetrie senkrecht zur Oberfläche gebrochen ist. Effekte, wie anisotrope thermische Schwingungsamplituden, Oberflächenstufen, vor allem aber Rekonstruktionen der Oberfläche, würden die analytische Rechnung zusätzlich verkomplizieren. Deshalb ermittelt man die Ionenflußdichteverteilung und die resultierende Auger-Elektronenausbeute $Y(\Theta)$ in Computersimulationen.

5.1. Gliederung und Aufbau der Simulationsprogramme

Die Entwicklung des Simulationsprogramms zur Berechnung der Auger-Elektronenausbeuteprofile baut auf Programmstrukturen von C. Varelas (beschrieben in Ref. [69]), H.D. Carstanjen [70] und W. Graser [71] auf.

Für die Simulation der Auger-Elektronenausbeute sind mehrere Computerprogramme zum Einsatz gekommen, die sich hinsichtlich des behandelten Oberflächenmodells (unrekonstruierte Oberfläche, Missing-Row-Rekonstruktion, Sägezahnrekonstruktion, Zickzackketten), der Adsorbatposition und der Projektileinschußrichtung (längs [001] oder $[1\bar{1}0]$) unterscheiden. Dabei handelt es sich

um verschiedene Versionen ein und desselben Programms. Die Struktur des Programms und die zugrunde liegenden physikalischen Prinzipien und Näherungen sind in allen Versionen gleich. Die Aufspaltung in separate Versionen ergibt sich aus dem Wunsch nach kurzer Rechenzeit und geringem Speicherplatzbedarf. Abschnitt 8 vermittelt einen Überblick über die einzelnen Programmversionen. Dort ist auch eine Programmversion mit einer vollständigen Beschreibung aller Variablen explizit aufgelistet. Anhand eines Struktogramms wird der Programmablauf verdeutlicht. Im folgenden wird der allgemeine Aufbau des Simulationsprogramms beschrieben; die physikalischen Grundlagen werden in den Unterabschnitten einzeln diskutiert.

Ein homogener paralleler Strahl von 150keV-Protonen, die auf die Kristalloberfläche treffen, wird im Programm durch eine Anzahl von $M \times N$ Projektilen simuliert. Die Projektilen haben alle gleiche Startenergie $E_1^{(0)}$ und gleichen Startimpuls $(p_x^{(0)}, p_y^{(0)}, p_z^{(0)})$, sie beginnen jeweils eine eigene Trajektorie oberhalb der Kristalloberfläche, treffen auf die Oberfläche und setzen ihre Bahn dann im Kristallgitter fort. Typische Werte von $M \times N$ sind 20×20 oder 40×20 Projektilen; zum Erstellen graphischer Flußdichteverteilungen und tiefeaufgelöster Ausbeuteprofile werden bis zu 80×40 Projektilen eingeschossen. Die Startkoordinaten $(x^{(0)}, y^{(0)}, z^{(0)})$ werden in äquidistanten Schritten so variiert, daß eine Oberflächeneinheit zelle gleichmäßig beschossen wird. Da die Einschußkoordinaten in $M \times N$ Schritten durch ein Raster bestimmt und nicht gewürfelt werden, ist der Begriff Monte-Carlo- oder auch stochastische Simulation hierfür nicht ganz zutreffend. Es handelt sich hier eher um eine deterministische Simulation.

In der Näherung kleiner Winkel werden die Impulskomponenten p_x und p_y und die Winkel zur niederindizierten Gitterrichtung θ und ϕ gleichgesetzt und in Grad gemessen. Daß es sich bei $\theta^{(0)}$ und $\phi^{(0)}$ um die Einschußwinkel handelt, wird in diesem Abschnitt durch den Index $i=0$ gekennzeichnet. Der Index i gibt die Zahl der Transversalebene an, die das Projektil durchstoßen hat. Unter Transversalebene sind Gitterebenen senkrecht zur Gitter-

föhrungsrichtung [hkl] zu verstehen. Die streuenden Targetatome befinden sich in den Transversalebene.

Die Koordinaten, die Winkel und die Festlegung der Achsen kann man aus Abb. 4.1 entnehmen. Im Computerprogramm wird die Oberflähe durch die Gitterpunkte der ersten Atomlage des Substrats definiert (nichtrekonstruierte Oberflähe). Sie legt auch die x-z-Ebene fest und bestimmt den Nullpunkt der y-Achse. Die z-Achse liegt parallel zur niederindizierten Richtung [hkl], längs der die Projektile eingeschossen werden. Das Programm berechnet nacheinander alle MxN Trajektorien der Projektile und föhrt alle Auswertungen zu den einzelnen Trajektorien aus. Eine Trajektorie setzt sich aus Bahnsegmenten zwischen den einzelnen Streuprozessen zusammen. Die Streuung wird durch einen binären Streuprozess zwischen dem Projektil (Proton) und dem jeweils nächstgelegenen Targetatom (Substratatom: Nickel, Adsorbatatom: Sauerstoff) beschrieben. Bei jedem einzelnen Stoß wird der Streuwinkel in der Impulsnäherung ermittelt, wobei als Streupotential das Thomas-Fermi-Molière Potential zugrunde gelegt ist. Infolge der Impulsnäherung entarten die Trajektorien zu einer Serie geradliniger Bewegungen. Da die Impulsnäherung nur bei kleinen Streuwinkeln gerechtfertigt ist und die Ionengitterföhrung nur unter kleinen Winkeln zu niederindizierten Kristallrichtungen möglich ist, werden die Knickpunkte der Trajektorie näherungsweise in die Transversalebene gelegt. In der Startebene (Transversalebene mit dem Index i=0) beginnt für das Projektil mit den Startdaten $E^{(0)}$, $p_x^{(0)} = \theta^{(0)}$, $p_y^{(0)} = -\phi^{(0)}$ und $(x^{(0)}, y^{(0)}, z^{(0)})$ die Berechnung der Streuungen. Dabei liegt der Startpunkt in einem Abstand von ca. $y^{(0)} = 1\text{nm}$ oberhalb der Kristalloberflähe. Das nächstgelegene Targetatom in dieser Transversalebene und die Koordinaten des Projektils $(x_C^{(0)}, y_C^{(0)}, z_C^{(0)})$ relativ zum Gitterplatz dieses Targetatoms werden bestimmt. Daraus ergeben sich die relativen Koordinaten

$$(x_{BC}^{(0)}, y_{BC}^{(0)}, z_{BC}^{(0)}) = (x_C^{(0)}, y_C^{(0)}, z_C^{(0)}) - (x_{TH}^{(0)}, y_{TH}^{(0)}, z_{TH}^{(0)}) \quad (5.1)$$

zum thermisch um $(x_{TH}^{(0)}, y_{TH}^{(0)}, z_{TH}^{(0)})$ vom Gitterplatz ausgelenkten

Targetatom. Aus dem Stoßparameter

$$b^{(0)} = \sqrt{x_{BC}^{(0)2} + y_{BC}^{(0)2}}, \quad (5.2)$$

der Projektilenergie $E_1^{(0)}$ und den Kernladungszahlen der Stoßpartner Z_1 und $Z_2^{(0)}$ berechnet man den Streuwinkel im Laborsystem $\vartheta_L^{(0)}$ (vgl. Abschnitt 5.2.2) und daraus für die nächste Transversalebene $i=1$ die Impulskoordinaten [70]

$$p_x^{(1)} = \Theta^{(1)} = p_x^{(0)} + \frac{x_{BC}^{(0)}}{b^{(0)}} \vartheta_L^{(0)} \quad (5.3)$$

$$p_y^{(1)} = -\Phi^{(1)} = p_y^{(0)} + \frac{y_{BC}^{(0)}}{b^{(0)}} \vartheta_L^{(0)} \quad (5.4)$$

und die Ortskoordinaten

$$x^{(1)} = x^{(0)} + p_x^{(1)} d_{p(hkl)} \quad (5.5)$$

$$y^{(1)} = y^{(0)} + p_y^{(1)} d_{p(hkl)}, \quad (5.6)$$

wobei $d_{p(hkl)}$ der Abstand der (hkl) -Transversalebene ist. So können die Orts- und Impulskoordinaten der i -ten Transversalebene rekursiv aus denen der $(i-1)$ -ten Transversalebene bestimmt werden und sukzessiv die Bahnsegmente eines Projektils konstruiert werden. Bei jedem Stoß wird die Projektilenergie $E_1^{(i)}$ um den Energieverlust $\Delta E_1^{(i)}$ vermindert.

Die Berechnung einer Trajektorie endet erst, wenn eine der folgenden Abbruchbedingungen erfüllt ist:

- $y^{(i)} > y_{\max}$, d.h. das Projektil wurde rückgestreut und hat den Kristall wieder verlassen. $y_{\max} = 1 \text{ nm}$.
- $y^{(i)} < y_{\min}$, d.h. das Projektil ist so tief in den Kristall eingedrungen, daß ausgelöste Auger-Elektronen nicht mehr aus dem Kristall austreten können und auch das Projektil keine Möglichkeit mehr hat,

zurück in den oberflächennahen Bereich zu gelangen. $y_{\min} = -100\text{nm}$.

$$|p_x^{(i)}| > p_{x \max},$$

$$|p_y^{(i)}| > p_{y \max},$$

d.h. die Gültigkeitsgrenze der Streuformel und der Einteilung der Transversalebene sind überschritten. $p_{x \max} = p_{y \max} = 30^\circ$.

$$E_1^{(i)} < E_{\min},$$

d.h. das Projektil hat soviel Energie verloren, daß die Ionisationswahrscheinlichkeit und damit die Möglichkeit, Auger-Elektronen zu erzeugen, vernachlässigbar gering ist. Für $M_{23}\text{VV}$ -Auger-Elektronen wird $E_{\min} = 5\text{keV}$ gesetzt; bei $L_{3}\text{VV}$ -Auger-Elektronen hingegen genügt es bis $E_{\min} = 30\text{keV}$ zu rechnen.

$$N_{\text{COL}} > N_{\text{COLMAX}},$$

d.h. die maximale Stoßzahl einer Trajektorie ist überschritten. Diese Schranke ist als Sicherheitsabbruch bei Endlosschleifen vorgesehen. $N_{\text{COLMAX}} = 5000$.

Wegen der Translationssymmetrie in x- und z-Richtung ist es möglich, sich in der x-z-Ebene auf eine Einheitszelle zu beschränken, wodurch die x- und z-Koordinaten in diese Einheitszelle transformiert werden können. Eine entsprechende Beschränkung in der y-Richtung ist nicht möglich, da die Translations-symmetrie durch die Oberfläche gebrochen ist. Die Translations-symmetrie in der x-z-Ebene ist auch der Grund dafür, warum es genügt, die Projektile beim Start gleichmäßig verteilt auf eine einzige Einheitszelle einzuschießen.

Zusammen mit der Berechnung der Trajektorien wird in jeder Transversalebene der jeweilige Durchstoßpunkt des Projektils $x^{(i)}$, $y^{(i)}$ registriert. Die Projektion der Durchstoßpunkte aller Trajektorien durch alle Transversalebene auf eine Ebene gibt eine räumliche Häufigkeitsverteilung der Projektile. Diese Verteilung der Durchstoßpunkte liefert die Flußdichteverteilung $F(x,y)$. Dabei wird der Fluß aller Projektile durch die Trans-versalebene erfaßt, ungeachtet ihrer jeweiligen Energie. Die so ermittelte Flußdichteverteilung hat sich als wichtiges Hilfsmittel für die Auswahl möglicher Adsorbatpositionen und Rekon-

struktionen erwiesen (vgl. Abschnitt 7).

Zur Berechnung der Auger-Elektronenausbeute Y wird bei jedem Stoß die Ionisationswahrscheinlichkeit I für den Stoßparameter $b^{(i)}$ und die Projektilenergie $E_1^{(i)}$ bestimmt. Summiert man alle diese Ionisationswahrscheinlichkeiten, getrennt nach der Tiefe, über alle Stöße aller Trajektorien auf, so erhält man die differentielle Auger-Elektronenproduktion $(d\hat{Y}/dy)(y)$ (vgl. Abschnitt 4.6.1). Um die differentielle Auger-Elektronenausbeute $(dY/dy)(y)$ zu bekommen, muß man die Ionisationswahrscheinlichkeiten $I(E_1^{(i)}, b^{(i)})$, gewichtet mit der Austrittswahrscheinlichkeit $P_E(y)$, aufsummieren. Schließlich faßt man die Ionisationswahrscheinlichkeiten aller Atomlagen, gewichtet mit den Austrittswahrscheinlichkeiten, zusammen und erhält damit die Auger-Elektronenausbeute Y . Die bisher beschriebenen Rechenschritte werden vom Programm für verschiedene Einschußwinkel $\theta^{(0)}$ wiederholt, um die Abhängigkeit der integralen Ausbeute $Y(\theta^{(0)})$ und der tiefenaufgelösten Auger-Elektronenausbeute $(dY/dy)(y, \theta^{(0)})$ vom Einschußwinkel $\theta^{(0)}$ zu erhalten. Für axiale Gitterführung ($\phi^{(0)}=10^\circ$) werden 14 $\theta^{(0)}$ -Werte zwischen 0° und 6° gewählt, bei planarer Gitterführung ($\phi^{(0)}=4,5^\circ$) 35 $\theta^{(0)}$ -Werte zwischen 0° und 12° .

Aus dem Streuwinkel des Projektils im Schwerpunktsystem Θ kann bei jedem Stoß der elastische Energieübertrag auf das Targetatom, der sog. nukleare Energieverlust, berechnet werden. Aus der integralen wie auch der tiefenaufgelösten Häufigkeitsverteilung dieser Energieüberträge lassen sich Aussagen über strahlinduzierte Versetzungen und Zerstäubung gewinnen (vgl. Abschnitt 6.7). Zusammen mit den Streuwinkeln des Rückstoßtargetatoms Θ_T und Φ_T kann man auch eine Winkel- und Energieverteilung der gestoßenen Targetatome angeben. Diese Verteilung berücksichtigt nur die primären Streuwinkel und Energieüberträge aufgrund des Projektilstoßes, nicht jedoch weitere Streuungen und Stoßkaskaden der Rückstoßtargetatome an ruhenden Targetatomen.

5.2. Streuung der Projektilen an Targetatomen

Bei der Bewegung im kristallinen Festkörper und an seiner Oberfläche sind Ionen verschiedenen Wechselwirkungen ausgesetzt. Statt wie Kawai et al. [72] die Lösungen zu einem Hamiltonoperator mit einem komplexen Potential anzusetzen, spaltet man die Berechnung auf in einen elastischen Teil, der die Streuung angibt, und einen inelastischen Teil, der alle Energieverlustmechanismen beinhaltet. Die Wirkung der Elektronen wird einerseits als Abschirmung dem Streupotential des Targetatoms zugeordnet, andererseits sind die Elektronen auch die Hauptursache des Energieverlustes. Das abgeschirmte Potential des Kerns, das die Protonen sehen, wird durch das Thomas-Fermi-Molière-Potential [73] beschrieben:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Xi\left(\frac{r}{a_{TF}}\right) \quad (5.7)$$

mit der Abschirmfunktion

$$\Xi\left(\frac{r}{a_{TF}}\right) = \sum_{i=1}^3 \alpha_i \exp\left(-\frac{\beta_i r}{a_{TF}}\right) \quad (5.8)$$

$V(r)$: Potentielle Energie des Projektils Z_1 im abgeschirmten elektrischen Feld des Atoms;

$$\alpha_i = (0,10; 0,55; 0,35);$$

$$\beta_i = (6,00; 1,20; 0,30);$$

und der Thomas-Fermi-Abschirmlänge a_{TF} für die Wechselwirkung zwischen Protonen und Targetatomen mit der Kernladungszahl Z_2 :

$$a_{TF} = 46,85 Z_2^{-1/3} \text{ [pm]} \quad (5.9)$$

$$(\text{Ni: } a_{TF} = 15,43\text{pm, O: } a_{TF} = 23,43\text{pm}).$$

5.2.1. Binärer Stoß

Die Bewegung der Ionen läßt sich unter den vorliegenden Bedingungen klassisch durch Trajektorien beschreiben [6]. In der Näherung binärer Stöße wird nur die Wechselwirkung mit dem nächstgelegenen Targetatom betrachtet. Man löst nicht die Bewegungsgleichungen im Kristallpotential, sondern behandelt eine Folge isolierter Streuprozesse an einzelnen Targetatomen. Die Bestimmung des nächstgelegenen Targetatoms erfordert im allgemeinen die Berechnung der Abstände aller benachbarten Targetatome. Dieses Vorgehen wird im Programm MARLOWE [74] angewandt, hat sich aber als sehr zeitaufwendig erwiesen.

Beschränkt man sich auf Bahnen mit kleinen Winkeln zu einer niederindizierten Kristallrichtung, so kann man die 3-dimensionale Suche nach dem nächsten Nachbarn auf eine 2-dimensionale Suche in der Transversalebene zurückführen. Man teilt dazu die Transversalebene in Streuzellen mit je einem Targetatom ein. Die Grenzen dieser 2-dimensionalen Streuzellen werden so gezogen, daß die Grenzen gleiche Abstände zu benachbarten Targetatomen besitzen (Abb. 5.1). Dabei werden bei Substrat- und Adsorbatatomen die jeweiligen Gitterplätze zugrunde gelegt. Verläuft die Projektiltrajektorie durch eine solche Streuzelle, so ist aufgrund der Näherung binärer Stöße das Projektil nur dem abstoßenden Potential des einen Targetatoms in dieser Zelle ausgesetzt; die Potentiale der benachbarten Atome werden vernachlässigt.

Fallen die Projektile nicht senkrecht auf die Transversalebene ein, dann ergibt sich bei der Bestimmung des Stoßparameters ein Fehler von der Größe $\cos \psi^{(i)}$, da statt des Stoßparameters b die Entfernung b^* des Durchstoßpunkts zum Targetatom benutzt wird (vgl. Abb. 5.2):

$$b^{(i)} = b^{*(i)} \cos \psi^{(i)}, \quad (5.10)$$

wobei

$$\cos \psi^{(i)} = \cos \theta^{(i)} \cos \phi^{(i)}. \quad (5.11)$$

Abb. 5.1: Abgrenzung der Streuzellen in Transversalebene beim Ioneneinschub entlang der $[001]$ -Richtung.

(●) Nickelatome in der Transversalebene;
 (—) Streuzellengrenzen in dieser Transversalebene;
 (○) Nickelatome in der nächsten Transversalebene;
 (///) (110) -Oberfläche.

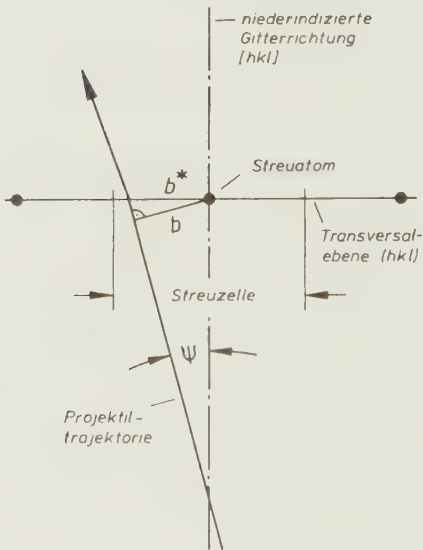
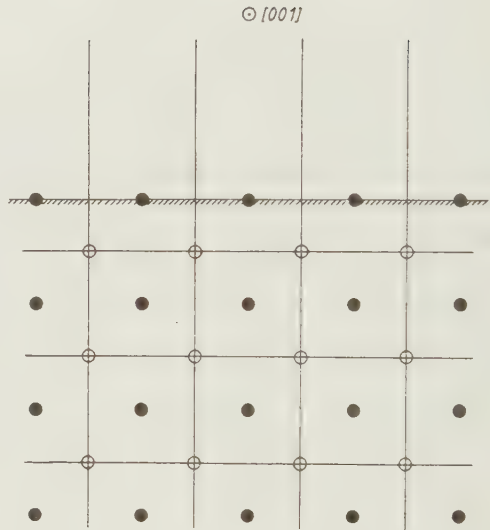


Abb. 5.2: Stoßparameterbestimmung beim binären Stoß.

Begrenzt man den Winkelbereich auf $-30^\circ < \theta^{(i)} < 30^\circ$ und $-30^\circ < \phi^{(i)} < 30^\circ$, so ist der Cosinusfaktor $0,75 \leq \cos \psi \leq 1$. Unter diesen Einschränkungen ist bei einem Stoß ein Streuwinkel ϑ_L von maximal $82,8^\circ$ möglich (L: Laborsystem). Die Abweichung des Stoßparameters verursacht dann einen Streuwinkelfehler $\Delta \vartheta_L$ von 16° bei 150 keV H^+ und von $17,5^\circ$ bei 5 keV H^+ . Diese Fehler sind zwar groß, doch besteht bei derart großen Winkeln ψ zur niederindizierten Richtung ohnehin keine Ionenführung mehr durch das Gitter. Bei der dann vorliegenden Randomstreuung stört eine solche Abweichung nicht. Darüberhinaus sind Großwinkelstreuungen äußerst selten. Bei kleinen Streuwinkeln ist der Fehler durch die Stoßparameterabweichung vernachlässigbar. Beispielsweise beträgt bei einem Einschub von $\psi = 1^\circ$ zur Gitterführungsrichtung und einem Streuwinkel ϑ_L von 1° der Fehler $\Delta \vartheta_L$ nur $0,00035^\circ$ bei der Streuung von 5 keV H^+ an Nickel. Die Gefahr, daß sich bei einer Abfolge mehrerer hundert Stöße die Fehler akkumulieren, besteht nicht, weil vor jedem Stoß thermische Gitterschwingungen für zufallsverteilte Auslenkungen der Targetatome von den Gitterplätzen sorgen.

Die Näherung binärer Stöße ist gut, wenn das Projektil mit kleinem Stoßparameter nahe am Streuatom vorbeifliegt, denn dann ist die Wechselwirkung mit dem Atom in der Streuzelle groß und mit den nächsten Nachbarn sehr klein. Passieren die Projektile nahe am Rand der Streuzelle, so wird der Einfluß des Nachbaratoms dem des Atoms in der Streuzelle vergleichbar. Doch bei hinreichend hohen Projektilenergien ist bei derart großen Stoßparametern $b = 0,125 \text{ nm}$ (halber Atomkettenabstand) der Streuwinkel ϑ_L so klein, daß die Bahn des Projektils durch die Näherung binärer Stöße nicht wesentlich verfälscht wird, z.B.:

$$5 \text{ keV H}^+ \rightarrow \text{Ni} \quad b = 0,125 \text{ nm} \quad \vartheta_L = 0,4^\circ \quad \text{und}$$

$$150 \text{ keV H}^+ \rightarrow \text{Ni} \quad b = 0,125 \text{ nm} \quad \vartheta_L = 0,009^\circ.$$

Folglich ist auch die Abgrenzung der Streuzellen nicht kritisch.

5.2.2. Impulsnäherung, Streuformel

Der Streuwinkel im Schwerpunktsystem berechnet sich bei klassischer Streuung an einem Kraftzentrum $V(r)$ nach [75, 76]:

$$\vartheta = \pi - 2 \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{b}{r^2 \sqrt{1 - \frac{V(r)}{E_r} - \left(\frac{b}{r}\right)^2}} dr \quad (5.12)$$

mit

$$E_r = \frac{m_2}{m_1 + m_2} E_1, \quad (5.13)$$

wobei $r_{\min}$ die Nullstelle des Radikanden und b der Stoßparameter ist. Für das Thomas-Fermi-Molière-Potential läßt sich das Integral so transformieren [77], daß das Integrationsintervall endlich wird und die Singularität verschwindet. Es kann dann mit einer Gauß-Legendre-Quadratur numerisch ausgewertet werden [78].

Einen anderen Weg zeigen Lehmann und Leibfried [75] auf. Sie entwickeln den Streuwinkel in eine Reihe:

$$\vartheta = \sum_{i=1}^{\infty} \vartheta_i. \quad (5.14)$$

Für kleine Streuwinkel kann man sich auf den ersten Term, die sog. Impulsnäherung beschränken:

$$\vartheta_1 = - \frac{1}{E_r} \frac{d}{db} \int_0^{\infty} V(\sqrt{\xi^2 + b^2}) d\xi. \quad (5.15)$$

Speziell beim Thomas-Fermi-Molière-Potential ergibt sich:

$$\vartheta_1 = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{E_r a_{TF}} \left[\frac{3}{1-1} \gamma_1 \gamma_1 K_1 \left(\frac{1}{a_{TF}} b \right) \right] \quad (5.16)$$

K_1 : Modifizierte Besselfunktion 2. Art 1. Ordnung [79].

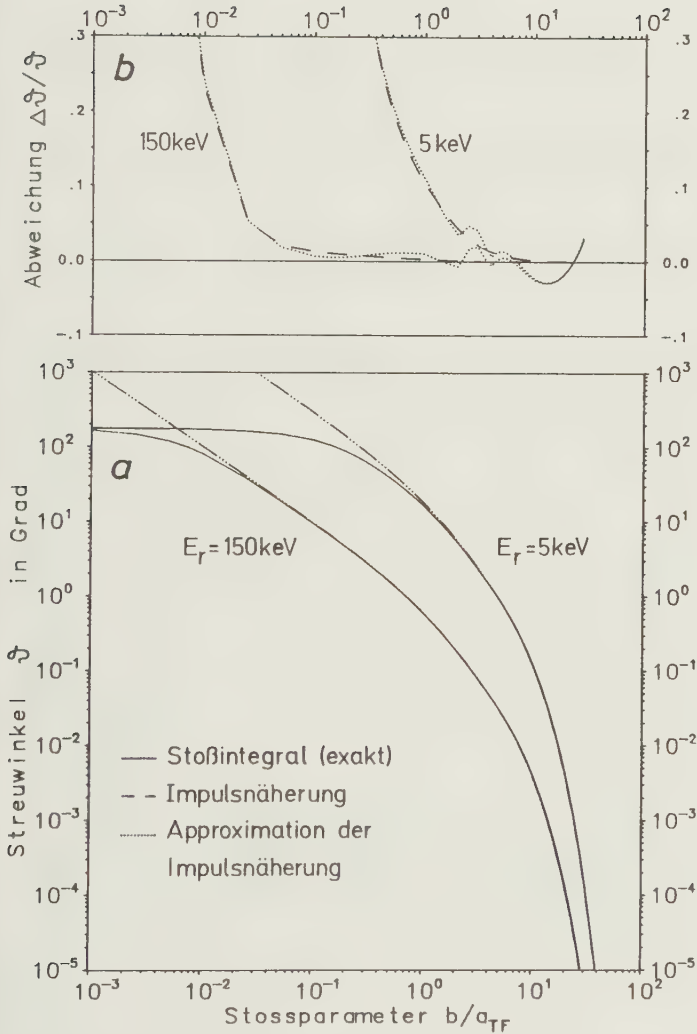


Abb. 5.3: (a) Streuwinkel in Abhängigkeit vom Stoßparameter für 150keV $H^+ \rightarrow Ni$ und 5keV $H^+ \rightarrow Ni$. (b) Abweichung des Streuwinkels vom exakten Stoßintegral. Stoßintegral nach Gl. (5.12), Impulsnäherung nach Gl. (5.16), Approximation dazu nach Gl. (5.17).

Zur schnelleren numerischen Berechnung kann man die Impuls-näherung durch folgenden Ausdruck von Varelas und Sizmann [80] approximieren:

$$\vartheta_1 \approx \frac{Z_1 Z_2 e^2}{E_r a_{TF}} \begin{cases} 1,01 \frac{a_{TF}}{b} \exp(-0,5 \frac{b}{a_{TF}}) & 10^{-3} \leq \frac{b}{a_{TF}} \leq 1,5 \\ (0,03 \frac{b}{a_{TF}} - 3,8 + 0,64) \frac{a_{TF}}{b} \exp(-0,3 \frac{b}{a_{TF}}) & 1,5 \leq \frac{b}{a_{TF}} \leq 30. \end{cases} \quad (5.17)$$

In Abb. 5.3a ist der Streuwinkel ϑ als Funktion des Stoßparameters b für die Streuung von 5keV und 150keV Protonen an Nickel in den verschiedenen Näherungen dargestellt. Die darüberliegenden Kurven (Abb. 5.3b) geben die Abweichungen $\Delta\vartheta$ der Impuls-näherung bzw. der Näherung nach Varelas und Sizmann vom exakten Streuwinkel an. Im Computerprogramm wird der Streuwinkel gemäß Gl. (5.17) berechnet. Bei Streuwinkeln ϑ über 30° wird der Fehler dieser Näherung größer als 5% bei 150keV Protonen und größer als 16% bei 5keV Protonen, doch unterliegen die Projek-tile nach Großwinkelstreuungen ohnehin keiner Gitterführung mehr. Dagegen werden die Kleinwinkelstreuungen der geführten Projektilen äußerst exakt bestimmt, z.B. wird eine Ablenkung von $\vartheta=1^\circ$ mit einer Genauigkeit von besser als 1,5% ermittelt. Gl. (5.17) ist also geeignet, Streuprobleme der Ionengitter-führung schnell und mit hinreichender Präzision zu berechnen.

Unter der Annahme kleiner Streuwinkel wird auch die Umrech-nung vom Schwerpunktsystem ins Laborsystem (L) vereinfacht von

$$\tan \vartheta_L = \frac{m_2 \sin \vartheta}{m_1 + m_2 \cos \vartheta} \quad (5.18)$$

zu

$$\vartheta_L = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vartheta. \quad (5.19)$$

Damit erhält man in Gl. (5.15), (5.16) und (5.17) unmittelbar den Streuwinkel im Laborsystem ϑ_L , wenn man E_r durch E_1 ersetzt.

5.2.3. Anziehung durch Bildladung

Befindet sich ein Projektil oberhalb der Kristalloberfläche, so wirken anziehende Kräfte durch die Verschiebung der Leitungsbandelektren an der Kristalloberfläche. Diese Kraft ist bedeutsam, da sie nicht abgeschirmt ist. Im quasistatischen Fall, wenn die Bewegung des Projektils langsamer als die Geschwindigkeit der Elektronen ist, kann man die anziehende Kraft durch eine Ladung, die spiegelbildlich zum Projektil angeordnet ist, beschreiben. In der folgenden Bewegungsgleichung soll nur dieses Bildpotential berücksichtigt werden (vgl. Abb. 5.4); nicht jedoch die atomare Struktur der Oberfläche:

$$\begin{aligned}
 m_1 \ddot{y} &= Q_1^2 e^2 / (2y)^2 \\
 m_1 \ddot{z} &= 0 \\
 \dot{y}(0) &= v_1 \sin \phi^{(0)} \\
 \dot{z}(0) &= v_1 \cos \phi^{(0)} \\
 y(0) &= \infty.
 \end{aligned}
 \tag{5.20}$$

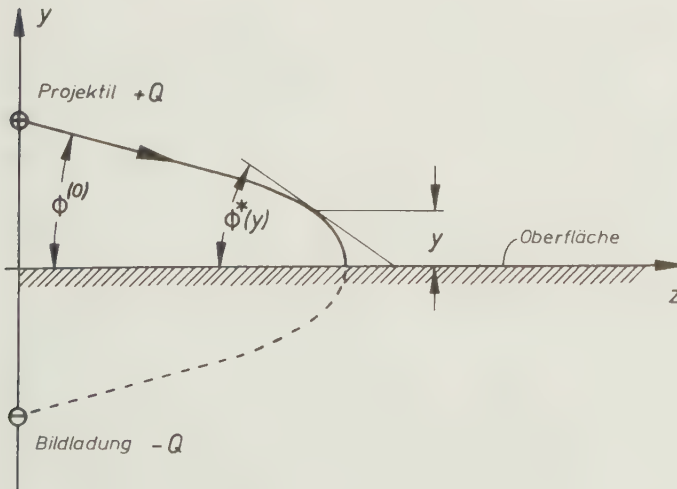


Abb. 5.4: Projektil unter dem Einfluß seiner Bildladung.

Die Lösung des Anfangswertproblems führt auf eine implizite Gleichung; doch die Neigung der Bahnkurve läßt sich wieder explizit angeben:

$$\tan \phi^* = \tan \phi^{(0)} \sqrt{1 + \frac{Q_1^2 e^2}{4 E_1 y \sin^2 \phi^{(0)}}} \quad (5.21)$$

Für große Abstände y stimmt diese Abschätzung recht gut, weil das Bildpotential das abstoßende Thomas-Fermi-Molière-Potential der Atomrümpfe übertrifft. Um eine Vorstellung von der Größenordnung des Effekts zu bekommen, wird die Bahnneigung ϕ^* des Projektils im Bildpotential ermittelt. Beim Einschuß von Protonen auf Nickel unter $\phi^{(0)} = 1^\circ$ folgt ein Neigungswinkel $\phi^*(y_0)$ von $1,037^\circ$ bei 150keV H^+ und von $\phi^*(y_0) = 1,807^\circ$ bei 5keV H^+ . ($y_0 = 0,104\text{nm}$ ist der Abstand von der Oberfläche, bei dem Bildpotential und planares Atompotential der Nickelatome gleich sind). Eigentlich sind für 150keV-Protonen mit $v_1 = 5,36 \cdot 10^8 \text{cm/s}$ die Voraussetzungen an die Geschwindigkeit der Leitungselektronen nicht mehr erfüllt, denn eine Plasmonenenergie $\hbar\omega_p$ von 19,13eV [81] entspricht einer Elektronengeschwindigkeit von $v_e = 2,59 \cdot 10^8 \text{cm/s}$. Bei höheren Projektilgeschwindigkeiten wird deshalb der Effekt der Bildladung weiter abnehmen, weil sich die Kristallelektronen nicht mehr schnell genug auf das Feld des Projektils einstellen können. Das Bildpotential bewirkt also bei Einschußenergien des Experiments $E_1^{(0)} = 150\text{keV}$ und Einschußwinkeln $\phi^{(0)} > 1^\circ$ eine Verbiegung der Trajektorie von weniger als $\phi^* - \phi^{(0)} = 0,037^\circ$.

Ohtsuki et al. [82] haben das Oberflächenpotential aufgrund der dynamischen Polarisierung der Leitungsbandelektronenwolke theoretisch studiert. Sie finden bei sehr flachen Einschußwinkeln einen gebundenen Bewegungszustand, bei dem das Projektil entlang der Oberfläche hüpfte, wie ein geworfener Stein an der Wasseroberfläche. Wenn der Austrittswinkel $\phi^{(\text{aus})}$ kleiner als der Ablenkwinkel $\Delta\phi$ ist, kehrt das austretende Projektil zur Oberfläche zurück.

$$\Delta\Phi = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{Z_1^2 e^2 \pi \omega_s}{v_1 E_1}} \quad (5.22)$$

$\Delta\Phi$: Ablenkwinkel des Projektils im Oberflächenpotential;

ω_s : Plasmafrequenz der Oberflächenplasmonen, $\omega_s = \omega_p / \sqrt{2}$.

Für 150keV-Protonen ergibt sich an einer Nickeloberfläche ein Ablenkwinkel $\Delta\Phi$ von $0,3^\circ$. Erst bei sehr niedrigen Energien wird der Ablenkwinkel $\Delta\Phi$ größer, z.B. $\Delta\Phi=3,9^\circ$ bei 5keV-Protonen.

Auf die Berechnung der Auger-Elektronenausbeute wirkt es sich nicht aus, wenn das Bildpotential bei der Berechnung der Trajektorien weggelassen wird, weil bei den niedrigen Energien, bei denen das Bildpotential die Streuung merklich beeinflusst, die Ionisationswirkungsquerschnitte bereits sehr klein sind (vgl. Tabelle 4.1 und 4.2).

5.3. Thermische Gitterschwingungen

In die Berechnung des Stoßparameters und des Streuwinkels muß man die thermischen Schwingungen der Targetatome um ihre Gleichgewichtslage einbeziehen. Aus der Sicht eines schnellen Projektils erscheinen die thermischen Schwingungen der Targetatome nicht als Bewegung, sondern als statische Auslenkung, weil die Geschwindigkeit der Projektils v_1 wesentlich größer ist als die thermische Bewegung der Targetatome, z.B. ist $v_1=5,38 \cdot 10^8 \text{cm/s}$ für 150keV-Protonen, während $\sqrt{v_2^2}=3,57 \cdot 10^4 \text{cm/s}$ für Nickelatome bei 300K (aus $m_2 v_2^2 = 3kT$). Legt man bei den thermischen Auslenkungen harmonische Schwingungen zugrunde, so sind diese Auslenkungen um ihre Gleichgewichtslage gaußverteilt [61]. Im Kristallinneren von fcc-Metallen führen die Atome isotrope Gitterschwingungen aus, die sich durch das Debye-Modell beschreiben lassen. Das Debye-Modell liefert eine mittlere quadratische Auslenkung (3-dimensional) von [83]:

$$u_3 = \frac{3 \hbar}{\sqrt{m_2 k T_D}} \left(\frac{T_D^2}{T_D^2} \int_0^{T_D/T} \frac{\xi d\xi}{e^\xi - 1} + \frac{1}{4} \right)^{1/2} \quad (5.23)$$

T_D : Debye-Temperatur; Nickel: $T_D=425\text{K}$ [6], $400\pm 10\text{K}$ [84, 85]. Aus rechentechnischen Gründen wird im Computerprogramm auch bei $T=300\text{K}$ die Hochtemperaturnäherung verwendet. Die geringe Abweichung von der Debye-Formel (5.23) von nur 3% rechtfertigt diese Vereinfachung. Mit

$$u_1^2 = 1/3 u_3^2 \quad (5.24)$$

wird für die 1-dimensionale mittlere quadratische Auslenkung im Kristallinneren somit angesetzt:

$$u_1 = \left(\frac{3 \hbar^2 T}{m_2 k T_D^2} \right)^{1/2}; \quad (5.25)$$

speziell für Nickel bei Raumtemperatur beträgt $u_1 = 6,6\text{pm}$.

In den obersten Atomlagen sind die thermischen Schwingungen anisotrop und größer als im Kristallinneren, wie LEED-Untersuchungen [86] gezeigt haben. Aus einer theoretischen Arbeit von Rovida et al. [87] ergeben sich folgende Auslenkungen für die obersten Atomlagen einer sauberen Ni(110)-Oberfläche:

Tabelle 5.1: Mittlere quadratische Auslenkungen (1-dimensional) als Vielfache der Auslenkung im Kristallinneren:

Richtung der Auslenkung	[110]	[$\bar{1}\bar{1}0$]	[001]
1. Atomlage	1,79	1,15	1,87
2. Atomlage	1,21	1,02	1,11
3. Atomlage	1,09	1,00	1,02
4. Atomlage	1,02	1,00	1,01
5. Atomlage	1,01	1,00	1,00

Auf die Streuung schneller Projektile, insbesondere unter Gitterführungsbedingungen, wirkt sich die thermische Schwingung längs der Führungsrichtung kaum aus, denn die geführten Projektile halten einen so großen Abstand, den sog. kritischen Abstand r_c (vgl. dazu Abschnitt 4.7.2), zu den Atomketten ein, daß sie nur ein gemittelttes Atompotential spüren. In den Computersimulationen wurden deshalb nur thermische Auslenkungen in den Transversalebene berücksichtigt, nicht aber längs der Führungsrichtung.

Die adsorbierten Sauerstoffatome besitzen eine starke Bindung zu den Nickelatomen des Substrats. Bei Temperaturen von 300K führen sie überwiegend Grundzustandsschwingungen relativ zum Nickelsubstratatom aus mit einer sehr kleinen mittleren quadratischen Auslenkung u_1 von 3,0pm [71]. Im Vergleich dazu beträgt die mittlere quadratische Auslenkung (1-dimensional) der obersten Nickelatome bis zu 12,3pm. Die Sauerstoffatome schwingen mit den Nickelatomen der ersten Atomlage mit, wobei das Schwingungsverhalten der Substratatom dominiert und vom adsorbierten Sauerstoff nur wenig beeinflusst wird [88]. Eine Diskussion der thermischen Schwingungen an Oberflächen im Hinblick auf die Ionengitterführung findet sich auch bei Graser [71].

Der Einfluß der Korrelation der Auslenkungen eines Atoms zu den Auslenkungen seiner Nachbaratome auf die Ionenstreuung wurde hier vernachlässigt.

Zur Erzeugung von gaußverteilten Zufallszahlen, genauer von je zwei unabhängigen (0,1)-normalverteilten Zufallszahlen, wird im Computerprogramm die polare Methode [89] angewandt. Sie geht von zwei unabhängigen [0,1]-gleichverteilten Zufallszahlen aus, die als Funktion RANF im Standard-FORTRAN zur Verfügung stehen. Um statistisch verteilte thermische Auslenkungen zu erhalten, werden die normierten gaußverteilten Zufallszahlen der Standardabweichung 1 mit der mittleren quadratischen Auslenkung u_1 multipliziert.

5.4. Energieverlust der Protonen

Schnelle Protonen verlieren im Festkörper kinetische Energie durch elastische Stöße mit den Targetatomen (nuklearer Energieverlust) sowie durch Wechselwirkung mit den Elektronen des Festkörpers (elektronischer Energieverlust). Elektronischer und nuklearer Energieverlust sind von derselben Größenordnung, wenn [90]

$$v_1 = 0,1 Z_1^{2/3} v_0 \quad (5.26)$$

v_0 : Bohr'sche Geschwindigkeit.

Bei Protonen liegt dieser Punkt bei einer Energie E_1 von 250eV. Im Energiebereich 10 - 150keV ist der Anteil des nuklearen Energieverlustes kleiner als 2,5% vom elektronischen, so daß der nukleare Anteil für die Abbremsung der Protonen in der Computersimulation vernachlässigt werden kann. Man darf aber dabei nicht übersehen, daß dieser Energieübertrag auf Targetatome für Strahlenschäden und Zerstäubung verantwortlich ist (vgl. Abschnitt 6.7). Deshalb wird in der Simulationsrechnung auch der Energieübertrag E_2 auf Targetatome berechnet. Er folgt aus dem Streuwinkel der Projektil:

$$E_2 = E_1 \frac{4 m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} \sin^2 \frac{\vartheta(E_1, b)}{2} \quad (5.27)$$

Der elektronische Energieverlust läßt sich in zwei Teile aufspalten, nämlich die Anregung stark gebundener Rumpfelektronen und die Wechselwirkungen mit Elektronen des Fermi-Gases. Die Anregung der Rumpfelektronen ist stark stoßparameterabhängig (vgl. dazu die Ionisation innerer Schalen Abb. 4.5), während die Wechselwirkung mit den Leitungsbandelektronen stoßparameterunabhängig ist. Bei der Anregung schwach gebundener Elektronen wird nämlich die adiabatische Länge groß im Vergleich zum Atomabstand (vgl. Abschnitt 4.7.2). Einen Überblick über

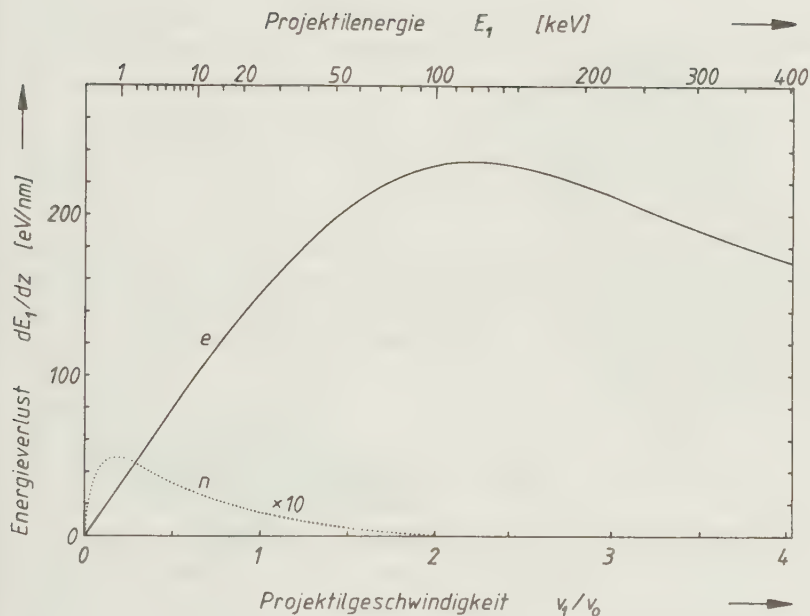


Abb. 5.5: Energieverlust von Protonen in Nickel bei Einschub in Randomrichtung in Abhängigkeit von ihrer Geschwindigkeit bzw. von ihrer Energie. e: Elektronischer Energieverlust [91]; n: Nuklearer Energieverlust [92].

Mechanismen und Theorien des Energieverlustes vermittelt ein Artikel von Gemmell [6]. Nur für Auger-Elektronen aus dem oberflächennahen Bereich besteht eine nicht verschwindende Wahrscheinlichkeit, aus dem Kristall austreten zu können. Hauptsächlich werden diese Auger-Elektronen von in den Kristall eintretenden Projektilen erzeugt, deren Energie E_1 nur wenig unterhalb der Einschubenergie $E_1^{(0)}$ liegt. Gering dagegen ist der Beitrag von Projektilen, die bereits tief ins Kristallinnere eingedrungen sind, viel Energie verloren haben und in den oberflächennahen Bereich zurückgekehrt sind. In der Computersimulation spielt deshalb der Energieverlust eine untergeordnete

Rolle. Gemäß den Tabellen von Andersen und Ziegler [91] wird ein pauschaler Energieverlust angesetzt, der nur von der Projektilenergie, nicht jedoch vom Stoßparameter abhängig ist (Abb. 5.5):

$$\Delta E^{(i)} = (dE_1/dz)(E_1^{(i)}) d_p(hkl) \quad (5.28)$$

$d_p(hkl)$: Abstand der Transversalebenebenen (hkl).

Verwendet man einen stoßparameterabhängigen Energieverlust, so ändert sich an der Auger-Elektronenausbeute bei Oberflächen-Ionengitterführung nichts Merkliches (vgl. Abschnitt 6.5.5).

5.5. Ionisationswahrscheinlichkeit

Wie in Abschnitt 4.2 und 4.6 diskutiert, ist die Ionisationswahrscheinlichkeit der Kernpunkt für die Berechnung der Auger-Elektronenausbeuten. Für Nickel stehen Tabellenwerte [36] in folgendem Stoßparameter- und Energiebereich zur Verfügung: Bei der L_3 -Schale $b=0,89 \dots 35,50\text{pm}$ $E_1=22,7\text{keV} \dots 27,8\text{MeV}$ und bei der M_{23} -Schale $b=1,90 \dots 75,85\text{pm}$ $E_1=655\text{eV} \dots 802\text{keV}$. Ionisationswahrscheinlichkeiten $I(b, E_1, \text{Orbital})$ mit kleineren oder größeren Stoßparametern oder kleineren Energien wurden extrapoliert, indem Exponentialfunktionen $C_1 \exp(c_1 b)$ bzw. $C_2 \exp(c_2 E_1)$ an die Tabellenwerte angepaßt wurden. Alle Tabellenwerte zusammen mit den extrapolierten Werten wurden durch bikubische Spline-Interpolationen für äquidistante Energie- ($E_1=7,5; 15; \dots 150\text{keV}$) und Stoßparameterwerte ($b=1; 3; 5; \dots 199\text{pm}$) neu tabelliert. Abb. 5.6a und b zeigen die in der Simulation verwendeten Ionisationswahrscheinlichkeiten $I(b, E_1)$ für die Nickel- L_3 - und M_{23} -Schale. Analog wurden auch die Ionisationswahrscheinlichkeiten der K-Schale von Sauerstoff aufbereitet.

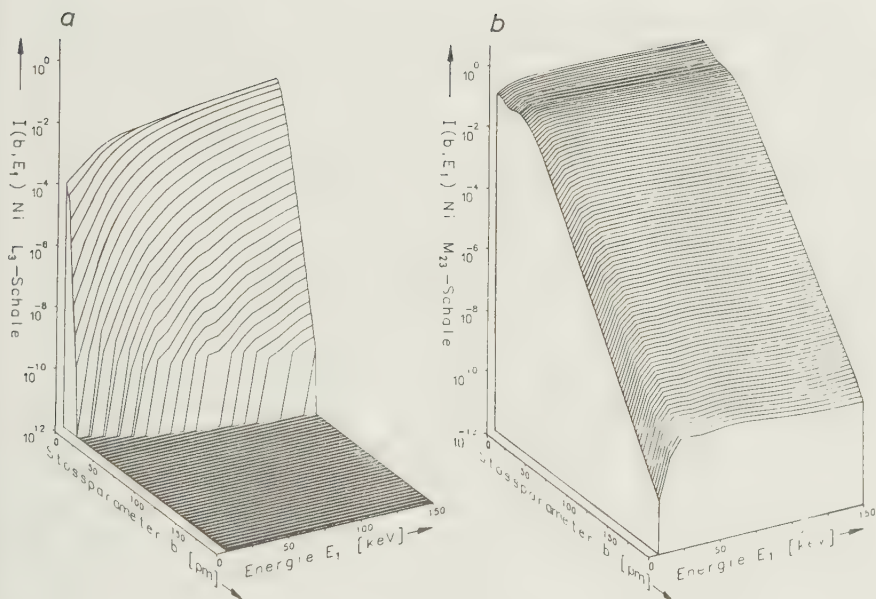


Abb. 5.6: Ionisationswahrscheinlichkeit I (a) der Nickel-L₃-Schale und (b) der Nickel-M₂₃-Schale in Abhängigkeit des Stoßparameters b und der Protoneneinschußenergie E_1 [36]. Die Ionisationswahrscheinlichkeit der L₃-Schale ist in der Darstellung auf Werte größer 10^{-12} beschränkt.

5.6. Oberflächenstufen

Das bisher beschriebene Computerprogramm simuliert eine idealisierte Anordnung von Targetatomen im Kristallinneren und an der Oberfläche. Im realen Festkörper jedoch existieren eine Reihe von Defekten, z.B. Leerstellen, Substitutionsfremdatome, Zwischengitteratome, Versetzungen, Mosaikverkipungen und an der Oberfläche zusätzlich noch Stufen. Auf die Auger-Elektronenaus-

beute wirken sich vor allem solche Defekte aus, die im oberflächennahen Bereich angesiedelt sind und die Ionenflußdichteverteilung beeinflussen. Da durch die Präparationstechnik (vgl. Abschnitt 3.1) und die Experimentführung für die Messungen ein reiner ausgeheilter Kristall bei Raumtemperatur bereitstand, spielen Leerstellen, Substitutionsfremdatome, Zwischengitteratome, Versetzungen und Mosaikverkipungen eine untergeordnete Rolle. Strahleninduzierte Defekte sind, wie in Abschnitt 6.7 diskutiert wird, unter den experimentellen Bedingungen ebenfalls zu vernachlässigen. Das größte Problem der Präparation ist das Herstellen einer atomar ebenen und sauberen Oberfläche. In diesem Punkt ist man, was die Oberfläche anbetrifft, noch weit von dem Standard entfernt, der im Kristallinneren erreicht ist. Die Unebenheit der Oberfläche führt zu einer Terrassenlandschaft im atomaren Bereich. Im Computerprogramm werden deshalb insbesondere auch Stufen in der Oberfläche simuliert. Dabei kann der Stufenabstand variiert werden. Er wird durch die Anzahl s der Transversalebene von Stufe zu Stufe angegeben (im Programm steht NK für die Größe s). Die simulierte Oberfläche weist im festen Abstand von s Transversalebene jeweils eine Stufe auf. Bei der Art der Stufe hat man die Wahl zwischen: Ohne Stufen, Aufwärtsstufe zur nächsten Netzebene ($0,125\text{nm}$), Abwärtsstufe zur nächsten Netzebene, abwechselnd solche Auf- und Abwärtsstufen, Aufwärtsstufe zur übernächsten Netzebene ($0,25\text{nm}$), Abwärtsstufe zur übernächsten Netzebene und wiederum solche Auf- und Abwärtsstufen im Wechsel. Simulationen zur Ionenoberflächenstreuung von Graser [71, 93] haben ergeben, daß bei streifend einfallenden Ionen der entscheidende Einfluß von den Aufwärtsstufen ausgeht, während die Abwärtsstufen wenig Bedeutung haben. Auf den Ionenfluß wirken sich die Stufen nur dann aus, wenn die Stufen quer zur Einschubrichtung verlaufen.

Die Stufen definieren eine neue Periodizitätslänge in z -Richtung. Deshalb muß durch die Variation der Einschubkoordinaten dafür gesorgt werden, daß der gesamte Bereich der Terrassenfläche und des Stufenanstiegs gleichmäßig mit Projektilen beschossen wird. Im Programm werden die Stufen

durch eine Transformation der Projektilkoordinaten simuliert, so daß die Kristallkoordinaten an den Stufen unverändert bleiben.

5.7. Erfassung und Normierung der Flußdichteverteilung

Die Translationssymmetrie in x- und z-Richtung erlaubt es, repräsentativ für die Oberfläche eine zweidimensionale Einheitszelle der Länge AZ und der Breite AX zu betrachten. Beim Einschuß auf eine saubere Ni(110)-Oberfläche längs der [001]-Richtung beträgt $AX=0,25\text{nm}$, $AY=0,25\text{nm}$ und $AZ=0,352\text{nm}$. Durch die geeignete Wahl der Startkoordinaten in der Startebene (0. Transversalebene) wird erreicht, daß diese Einheitszelle gleichmäßig von der vorgegebenen Anzahl von $M \times N$ Projektilen bestrahlt wird. Dazu teilt man bei einem Einschußwinkel $\theta^{(0)}$ zur Führungsrichtung die Strecke AX in M gleiche Intervalle (Abb. 5.7 und 5.8).

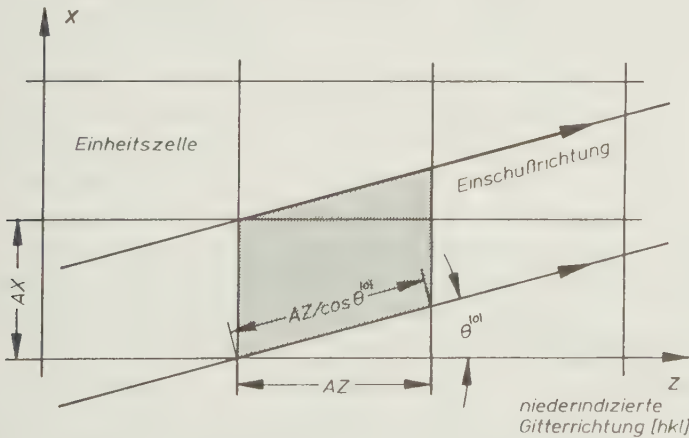


Abb. 5.7: Prinzipskizze zum Projektileinfall auf die Oberfläche in der Simulation (von oben gesehen). Eine translations-symmetrische Einheitszelle der Oberfläche wird gleichmäßig mit Projektilen beschossen. Die beiden fetten Pfeile begrenzen das Bündel der einfallenden Projektil lateral.

Diese Einteilung legt die Flußdichte der Projektile fest, die durch die Startebene einfallen:

$$F_{\text{ein}}(x_i, y_j) = \frac{N}{\frac{AZ \tan \Phi^{(0)}}{\cos \Theta^{(0)}}} \frac{M}{AX} \quad (5.29)$$

Unter Flußdichte versteht man die Anzahl der Projektile, die durch die Transversalebene pro Flächen- und pro Zeiteinheit durchtreten.

Bei Bestrahlung allein der Einheitszelle wird die Flußdichte der gestreuten Projektile dadurch ermittelt, daß man bei jedem Durchtritt eines Projektils durch eine Transversalebene dieses Ereignis gemäß der Projektilkoordinaten x und y in einem Rasterfeld registriert. Die Häufigkeit der Durchtritte pro Rasterfeld von der ersten bis zur letzten Transversalebene liefert die Flußdichte, wenn man die Zählereignisse auf die Größe eines Rasterfeldes bezieht. Die so bestimmte Flußdichte ist identisch mit der Flußdichte, die man erhalten würde, wenn man die gesamte Oberfläche gleichmäßig bestrahlen und den Fluß in einer einzigen Transversalebene messen würde. Diese Äquivalenz ist gültig, wenn beim Beschuß allein der Einheitszelle der Abstand der Ebenen, in denen der Fluß registriert wird, gleich der Länge AZ der Einheitszelle ist. Wenn, bezogen auf die Länge AZ einer Einheitszelle, mehrere solche Registrierebenen eingeführt werden, muß man die Zählereignisse noch durch die Anzahl N_R der Registrierebenen dividieren. Beim Einschuß auf die nichtrekonstruierte Oberfläche in $[001]$ - und $[\bar{1}\bar{1}0]$ -Richtung wurden in jeder Transversalebene die Durchtritte registriert, und deshalb $N_R=2$ gesetzt (vgl. Abb. 5.8). Die Registrierebenen sind in Rasterzellen unterteilt, wobei in x -Richtung K Rasterzellen auf die Einheitslänge AX und in y -Richtung L Rasterzellen auf die Einheitslänge AY kommen. Werden in der Rasterzelle (ij) f_{ij} Zählereignisse registriert, wobei $i=1, \dots, K$, $j=1, \dots, L$, so ergibt sich für die Flußdichte der gestreuten Projektile:

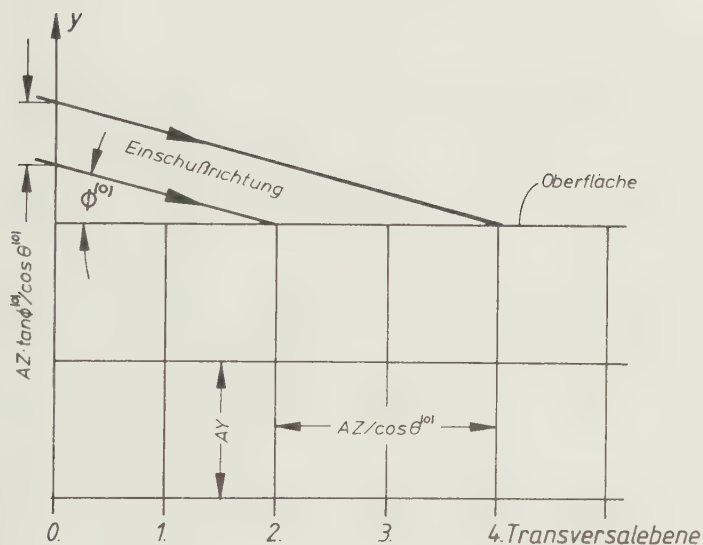


Abb. 5.8: Prinzipskizze zum Projektileinfall auf die Oberfläche in der Simulation (von der Seite gesehen). Die beiden fetten Pfeile begrenzen das Bündel einfallender Projektile in y-Richtung. Die 0. Transversalebene ist die Startebene der Projektile.

$$F_{\text{gestr}}(x_i, y_j) = \frac{f_{ij}}{\frac{AX}{K} \frac{AY}{L} N_R}. \quad (5.30)$$

Im Computerprogramm wird die gestreute Flußdichte F_{gestr} auf die einfallende Flußdichte F_{ein} normiert und dann als relative Flußdichte F_{rel} bezeichnet:

$$F_{\text{rel}}(x_i, y_j) = \frac{AZ \tan \phi^{(0)}}{N_R AY \cos \theta^{(0)}} \frac{K L}{M N} f_{ij}. \quad (5.31)$$

Diese Formel gilt auch, wenn Stufen simuliert werden, da im Programm dabei das Kristallgitter unverändert bleibt und lediglich die Projektilkoordinaten an den Stufen transformiert werden.

Die Flußdichte wird im Bereich $AY \leq y < -4AY$ mit einer Auflösung von $K=20$ und $L=20$ Rasterzellen pro Einheitslänge AX bzw. AY ermittelt. Für die graphische Darstellung wird nur der oberflächennahe Bereich $AY \leq y \leq -1,5AY$ erfaßt und in ein gröberes Raster mit $K=10$ und $L=10$ Rasterzellen eingelesen, um im Graphikprogramm GRAFLU die Stützstellen mit einer geringeren statistischen Schwankung angeben zu können. So berechnete relative Flußdichteverteilungen sind in Abschnitt 4.1 und 7.3 für verschiedene Oberflächenstrukturen und Einschußrichtungen durch Höhenlinien dargestellt.

5.8. Testmöglichkeiten des Computerprogramms

Ein umfangreiches Computerprogramm, wie das hier vorliegende, muß komponentenweise Tests ermöglichen. Dazu dient die Überprüfung einzelner Trajektorien mit frei vorwählbaren Startkoordinaten (Programmsteuerparameter $NP9=1$). Für ein Projektil werden alle physikalisch wichtigen Größen wie Koordinaten, Impuls, Energie, Streupartner, Stoßparameter, Streuwinkel, Energieverlust und Auger-Elektronenausbeuten bei jedem einzelnen Stoß dieser Trajektorie aufgelistet. Damit lassen sich innere Strukturen des Programms überprüfen, wie die Einteilung der Streuzellen, die Gitterstruktur, die Transformation durch Stufen, der gesamte Streuprozess, die Ionisationswahrscheinlichkeiten und die Austrittswahrscheinlichkeiten der Auger-Elektronen.

Eine nachgeordnete Testhilfe stellt die Ausgabe der Endergebnisse zu jeder einzelnen Projektiltrajektorie dar ($NP8=1$). Hierbei werden jeweils die letzten Koordinaten, Impulse, Energie und Streudaten der Trajektorie sowie das Kriterium, das zum Abbruch der Trajektorienberechnung geführt hat, ausgedruckt.

Die Verteilung der Flußdichte ($NP6=1$ oder $NP7=1$) ist ein weiterer Prüfstein für die richtige Programmierung der Kristall- und Oberflächenstruktur. Die Symmetrien des Gitters müssen sich in der Flußdichteverteilung widerspiegeln.

6. Ergebnisse aus Ionenstreuexperimenten und Computersimulationen

6.1. Spektren ioneninduzierter Auger-Elektronen

In einem Versuchsaufbau, wie in Abschnitt 3.2 beschrieben, wird eine Nickelprobe mit einem 150keV-Protonenstrahl von $I_1=250\text{nA}$ unter einem Winkel Φ von 5° beschossen. Dabei untersucht man das Spektrum der Auger-Elektronen, die durch die Protonenanregung induziert werden. Um bei dieser Messung eine Abhängigkeit vom lateralen Einschußwinkel Θ auszuschließen, wird eine polykristalline Nickelprobe verwendet. Zur Aufzeichnung eines Spektrums von $E_e=0$ bis 900eV ist eine Aufnahmezeit von 300s bis 900s und eine Zeitkonstante von 1s bzw. 3s zweckmäßig. Obwohl in der 2. Ableitung der Elektronenenergieverteilung die Auger-Linien deutlicher zu erkennen sind (vgl. Abschnitt 3.5), ist in Abb. 6.1 die 1. Ableitung der Elektronenenergieverteilung $N'_e(E_e)$ wiedergegeben, um das Spektrum besser mit den üblichen Darstellungen elektroneninduzierter Auger-Elektronenspektren vergleichen zu können. In dieser Abbildung sind zwei Spektren ein und derselben ungereinigten Nickelloberfläche gegenübergestellt. Bei Beschuß mit 2keV Elektronen ergibt sich das Spektrum oben in Abb. 6.1, das untere Spektrum bei Beschuß mit 150keV-Protonen. Das ioneninduzierte Spektrum zeigt dieselben Auger-Linien wie das Spektrum bei Elektronenbeschuß. Doch im Gegensatz zum elektronenangeregten Spektrum nimmt beim ioneninduzierten Spektrum die Auger-Linienstärke mit ansteigenden Elektronenenergien E_e deutlich ab, da der Ionisationswirkungsquerschnitt mit steigender Elektronenbindungsenergie E_w stark abfällt (vgl. Tabelle 4.1 und 4.2). Im ioneninduzierten Spektrum erkennt man die Auger-Linien von Nickel $M_{23}VV$ bei 61eV und M_1VV bei 102eV, von Schwefel $L_3M_{23}M_{23}$ bei 152eV, von Chlor $L_3M_{23}M_{23}$ bei 181eV und von Kohlenstoff $KL_{23}L_{23}$ bei 273eV. Erhöht man die Verstärkung um den Faktor 40, so sind auch die Auger-Linien von Sauerstoff $KL_{23}L_{23}$ bei 510eV und von Nickel

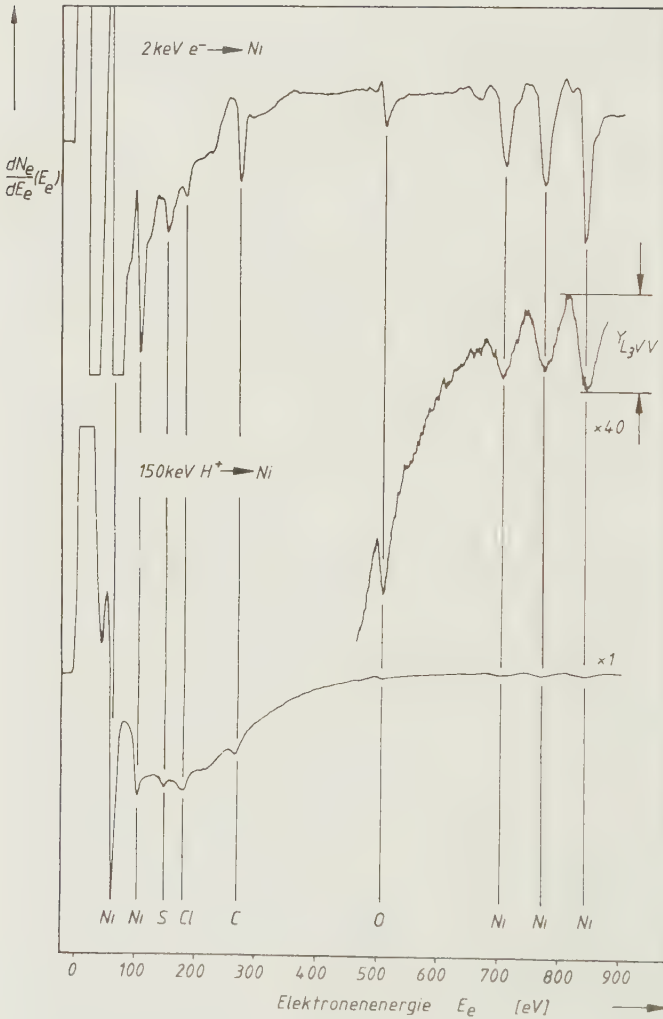


Abb. 6.1: Elektroneninduziertes und ioneninduziertes Auger-Spektrum ein und derselben ungereinigten Nickeloberfläche im Vergleich. Elektroneninduziertes Spektrum: $E_1=2\text{keV}$, $I_1=10\mu\text{A}$, $\phi=85^\circ$, $\tau=1\text{s}$, Aufnahmezeit=300s. Protoneninduziertes Spektrum: $E_1=150\text{keV}$, $I_1=250\text{nA}$, $\phi=5^\circ$, $\tau=3\text{s}$, Aufnahmezeit=900s.

$L_3M_{23}M_{23}$ bei 716eV, $L_3M_{23}V$ bei 783eV und L_3VV bei 848eV [49, 94] klar ersichtlich.

Anhand solcher Auger-Linien kann man auch mit ioneninduzierter Auger-Elektronenspektroskopie Substrat- und Adsorbatatome an der Oberfläche identifizieren. Wegen kleinerer Wirkungsquerschnitte ist jedoch die ioneninduzierte Auger-Elektronenspektroskopie, zumindest bei Projektilenergien E_1 unterhalb des velocity matching points (vgl. Abschnitt 4.2.1), nicht so empfindlich wie die übliche elektroneninduzierte Auger-Elektronenspektroskopie. Nur für Auger-Übergänge WXY mit Elektronenbindungsenergien $E_W < 100\text{eV}$ erweist sich die Anregung mit 150keV-Protonen der üblichen Anregung mit 2keV-Elektronen als gleichwertig. Trotz dieser ungünstigen Voraussetzungen konnte bei protoneninduzierter Auger-Elektronenspektroskopie dennoch eine Bedeckung von 0,05 Monolagen (ML) Sauerstoff registriert werden (diese Bedeckung entspricht einer Aussetzung von $0,2\text{Langmuir} = 2,66 \cdot 10^{-5}\text{Pa}\cdot\text{s}$ Sauerstoff; $H^+ \rightarrow O/Ni(110)$, $E_1=150\text{keV}$, $I_1=460\text{nA}$, $\Phi=1^\circ$, $\Theta=\text{random}$, $\tau=10\text{s}$).

6.2. Bedeckungsmessung mit ioneninduzierter Auger-Elektronenspektroskopie zur Untersuchung des Ionisationsprozesses

In Abschnitt 4.2 sind mehrere Mechanismen angesprochen worden, die zur Auger-Elektronenemission führen können, wenn eine Nickelprobe mit Ionen beschossen wird. Insbesondere die Frage, welche Rolle die Anregung durch schnelle Rückstoßatome spielt, wird in der Literatur kontrovers diskutiert (vgl. auch Abschnitt 4.2.2.1) [54]. Im Vordergrund steht dabei die Frage: Welche Bedeutung hat die Ionisation durch Projektil-Target-Stoß und welche die Ionisation durch Target-Target-Stoß. Bei Target-Target-Stößen treffen schnelle Rückstoßtargetatome hervorgerufen durch Projektil-Target-Stöße, sog. primäre Rückstoßatome (PRA), auf ruhende Targetatome. Um den Einfluß der

Ionisation durch Target-Target-Stöße bei Protonenbeschuß zu klären, wurde folgendes Experiment durchgeführt. Eine saubere Ni(110)-Oberfläche wurde streifend unter $\Phi=1^\circ$ mit 150keV-Protonen beschossen. Diese Oberfläche wurde bei einem konstanten Sauerstoffpartialdruck von $p=1,3 \cdot 10^{-7}$ Pa (10^{-9} torr) sukzessive mit Sauerstoff bedeckt und gleichzeitig die Ausbeute ionen-induzierter Sauerstoff-KL₂₃L₂₃-Auger-Elektronen ($E_{KL_{23}L_{23}}=510$ eV) gemessen. Als Maß für die Auger-Elektronenausbeute $Y_{KL_{23}L_{23}}$ wird die Höhe, Spitze-Spitze, dieser Auger-Linie genommen (vgl. Abb. 6.1).

Unabhängig vom speziellen Mechanismus der Auger-Elektronenauslösung in den Target-Target-Stößen sollte sich die Auger-Elektronenausbeute aus den Targetatomen proportional zum Quadrat der Konzentration ($\hat{=}$ relative Bedeckung B) der untersuchten Targetatome verhalten [95]. Die Anfangsphase der Bedeckung läßt sich als Langmuir-Prozeß beschreiben [96]. Die relative Bedeckung B hängt dann mit der Aussetzung ($=$ Druck $\cdot$ Zeit) $p \cdot t$ über folgende Beziehung zusammen:

$$B = 1 - \exp \left(- \frac{H p t}{B_H n_A \sqrt{\pi k T m_2}} \right) \quad (6.1)$$

- H: Haftkoeffizient; in der Anfangsphase der Bedeckung beim System Nickel-Sauerstoff $H=1$, bei größerer Bedeckung $H<1$;
 p: Partialdruck von Sauerstoff O₂;
 t: Zeit;
 n_A: Flächendichte der Kristallatome;
 bei Ni(110) $n_A=1,13 \cdot 10^{15}$ cm⁻²;
 B_H: Bedeckung;
 B_Hn_A: Flächendichte der Adsorbatplätze;
 k: Boltzmann-Konstante;
 T: Temperatur;
 m₂: Masse der Adsorbatatome.

Man kann den Ausdruck (6.1) nach Potenzen der Aussetzung $p \cdot t$ entwickeln und erhält für kleine Aussetzungen eine lineare Beziehung zwischen der relativen Bedeckung B und der Aussetzung $p \cdot t$:

$$B \approx \frac{H}{B_H n_A \sqrt{\pi k T m_2}} (p \cdot t). \quad (6.2)$$

Sollten Target-Target-Stöße beim Auger-Anregungsprozeß dominieren, so müßte für kleine Aussetzungen die Auger-Elektronenausbeute Y quadratisch mit der Aussetzung $p \cdot t$ ansteigen:

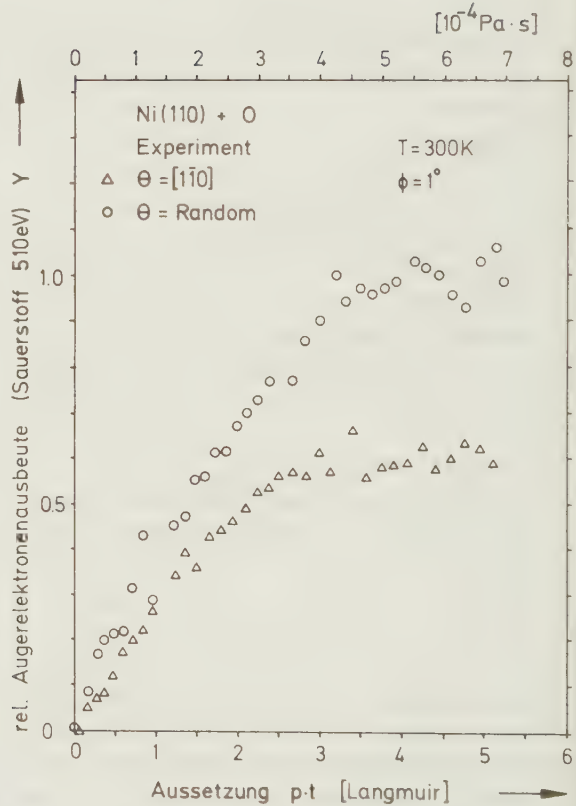
$$Y \sim (p \cdot t)^2. \quad (6.3)$$

Dagegen würde bei einer Anregung durch Projektil-Target-Stöße ein linearer Zusammenhang gelten:

$$Y \sim (p \cdot t). \quad (6.4)$$

Wie Abb. 6.2 beweist, wächst die Auger-Elektronenausbeute Y nicht quadratisch mit der Aussetzung $p \cdot t$, sondern bei kleinen Aussetzungen linear. Dieses spricht gegen die Anregung durch Target-Target-Stöße und für die Anregung durch Projektil-Target-Stöße. Auch wenn die Anregung durch Target-Target-Stöße bei schweren Projektilen nicht auszuschließen ist [97] und dann auch die Positionsbestimmung der Adsorbate beeinträchtigt werden könnte, so spielt dieser Mechanismus bei Beschuß mit leichten Ionen, wie im vorliegenden Fall, keine Rolle.

Abb. 6.2: Gemessene Ausbeute von Sauerstoff-KL₂₃L₂₃-Auger-Elektronen (510eV) als Funktion der Sauerstoffaussetzung. Die Anregung erfolgt durch 150keV-Protonen bei Einschub (Δ) entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung und ($\circ$) entlang einer Randomrichtung.



6.3. Einfluß des Einschubwinkels ϕ auf die Auger-Elektronenausbeute

Die Abhängigkeit der Ausbeute an ioneninduzierten Auger-Elektronen des Substrats ist in Abb. 6.3 als Funktion des Einschubwinkels ϕ dargestellt. Dazu wurde die Ausbeute Y der Nickel-M₂₃VV-Auger-Linie (61eV) an einer sauberen polykristallinen Nickeloberfläche gemessen, die mit 150keV-Protonen

bestrahlt wurde. Einen ähnlichen Verlauf, wie die hier gezeigte Kurve, hat auch die Nickel-L₃VV-Auger-Elektronenausbeute, die Pfandzelter [98] an einer sauberen Ni(100)-Oberfläche unter $\Theta = \text{random}$ gemessen hat. Für kleine Einschubwinkel Φ steigt die Meßkurve fast linear bis $\Phi = 4^\circ$ an, um dann oberhalb dieses Wertes, zu größeren Werten von Φ hin, leicht abzufallen. Der genaue Kurvenverlauf hängt von den Akzeptanzeigenschaften des Elektronenenergieanalysators, der Anordnung der Probe, den Ionenstreueigenschaften von Target und Projektil und natürlich von der mittleren Austrittslänge der untersuchten Elektronen ab. Doch kann man die zwei verschiedenen Bereiche der Kurve, den Anstieg und den Abfall, qualitativ richtig deuten.

Der Elektronenenergieanalysator (CMA) erfaßt aufgrund der Blendenanordnung nur Elektronen aus einer begrenzten Zone der Targetoberfläche (vgl. Abschnitt 3.3). Da bei flachem Einschub der Ionenstrahl ein weit größeres Gebiet überstreicht, ist die Zahl der Ionen, die auf die effektive Analysierzone treffen, proportional zu $\sin\Phi$, d.h. zu Φ . Dies ist die Ursache für den linearen Anstieg der Auger-Elektronenausbeute bei kleinen Einschubwinkeln Φ .

Den Abfall der Auger-Elektronenausbeute bei großen Einfalls-
winkeln kann man anhand eines einfachen Modells erklären, in dem die Trajektorien der Projektile als geradlinig (Abb. 6.4) angenommen werden und die Auger-Elektronenproduktion nur von der Energie des Projektils abhängen soll. Die momentane Energie E_1 und die Reichweite $\zeta_{\max}$ des Projektils wird durch seinen Energieverlust bestimmt. Setzt man die Austrittswahrscheinlichkeit der freigesetzten Elektronen an, wie in Abschnitt 4.5, so folgt für die Abhängigkeit der Auger-Elektronenausbeute Y vom Winkel Φ :

$$Y(\Phi) = \text{const} \cdot \int_0^{\zeta_{\max}} \sigma_I(E_1(\zeta)) \exp\left(-\frac{\zeta \sin \Phi}{\lambda \cos \alpha}\right) d\zeta. \quad (6.5)$$

Abb. 6.3: Gemessene Ausbeute von Nickel-L₃VV-Auger-Elektronen (848eV) induziert durch 150keV-Protonen als Funktion des Einschubwinkels ϕ . Lateral erfolgt der Einschub in Randomrichtung. Die Ausbeute ist auf den Maximalwert bei $\phi=4^\circ$ normiert.

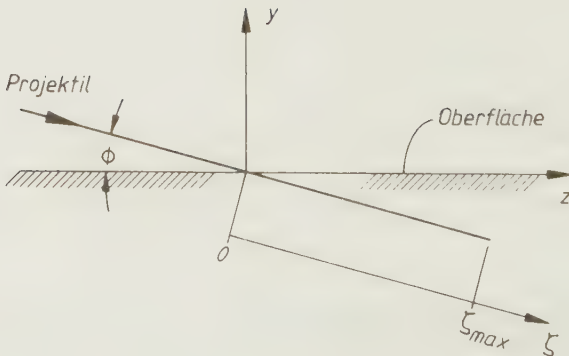
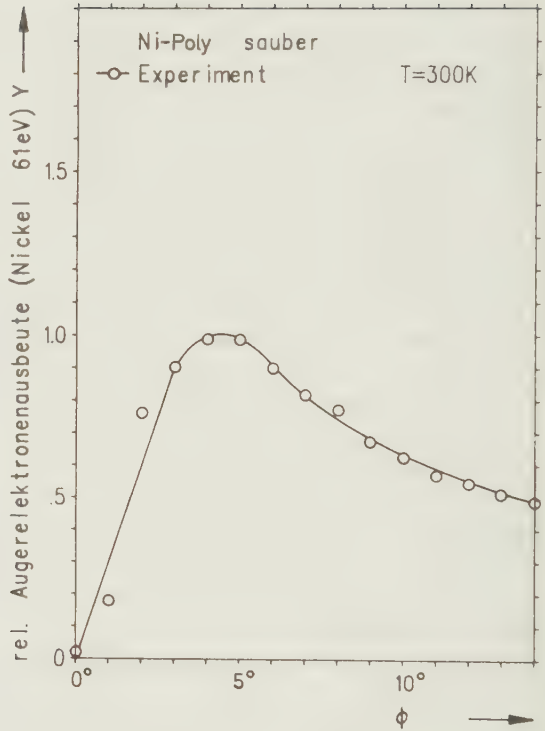


Abb. 6.4: Schematischer Ioneneinfall zur Erklärung der Abhängigkeit der Ausbeute $Y(\phi)$.

Außer für ganz kleine Winkel Φ kann man annehmen, daß die mittlere Austrittslänge λ wesentlich kürzer ist als die Länge, auf der das Projektil merklich Energie verliert. Als Näherung setzt man deshalb $\sigma_I(E_1(\zeta)) = \text{const.}$ und läßt ζ_{max} gegen Unendlich gehen:

$$Y(\Phi) = \text{const} \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{\zeta \sin \Phi}{\lambda \cos \alpha}\right) d\zeta \quad (6.6)$$

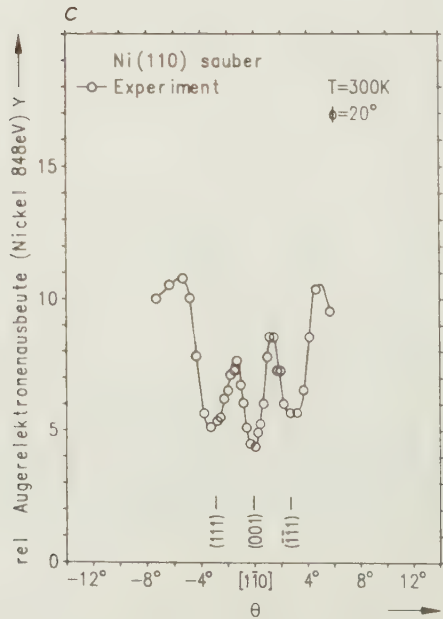
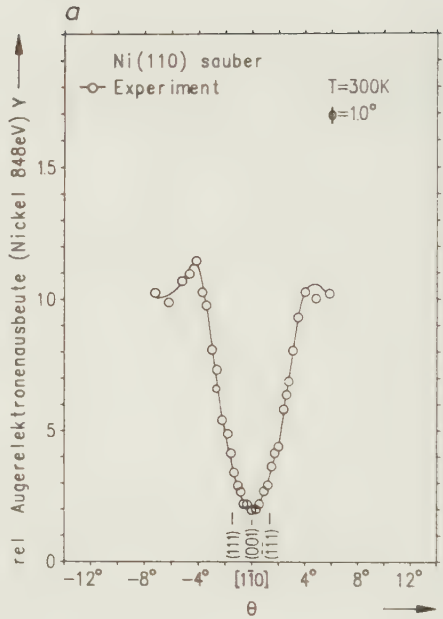
$$Y(\Phi) = \text{const} \frac{\lambda \cos \alpha}{\sin \Phi}. \quad (6.6a)$$

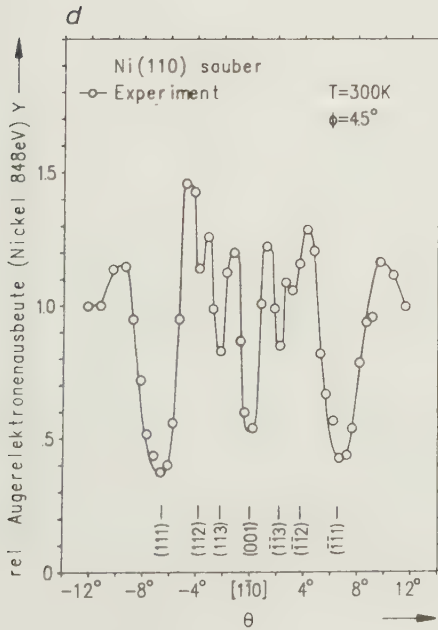
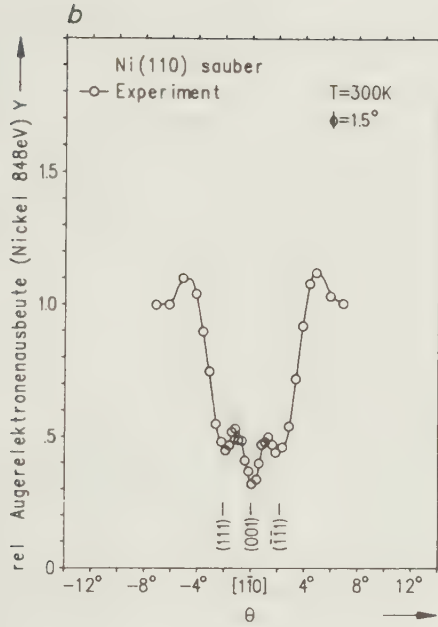
Die gemessenen Kurven zeigen für große Winkel Φ näherungsweise die $(\sin \Phi)^{-1}$ -Abhängigkeit. Für kleine Einschußwinkel Φ kann dieses einfache Modell nicht mehr gelten, da wegen der Kristallabmessungen nur noch ein Teil des Strahls in der effektiven Analysierzone Elektronen freisetzt und auch nicht mehr alle Projektile, die noch auf die Oberfläche treffen, in flacher Trajektorie in den Kristall eindringen. Viele Projektile werden spiegelnd reflektiert und machen keine Stöße mehr unter kleinen Stoßparametern, so daß die Ausbeute abnimmt.

6.4. Vergleich von axialer und planarer Gitterführung an der Oberfläche

Ionen, die entlang niederindizierter Richtungen unter kleinen Winkeln Φ zur Oberfläche einfallen, erfahren durch das Zylinderpotential der Atomketten axiale Gitterführung. Vergrößert man den Winkel Φ und schießt parallel zu niederindizierten Ebenen ein, wird ein Großteil der Projektile zwischen den Gitterebenen geführt (planare Gitterführung). Für 150keV-Protonen in Nickel liegt der kritische Winkel (vgl. Abschnitt 4.7.7) des Übergangs

Abb. 6.5: Übergang von der (a) axialen Oberflächen-Ionengitterführung zur (d) planaren Ionengitterführung. Ausbeuteprofil $Y(\theta)$ der Nickel- L_3VV -Auger-Elektronen für verschiedene Einschubwinkel: (a) $\phi=1^\circ$, (b) $1,5^\circ$, (c) 2° und (d) $4,5^\circ$.





von der axialen Gitterführung entlang der [001]-Richtung zur planaren Gitterführung zwischen den ($\bar{1}10$)-Ebenen bei $\phi_c = 1,52^\circ$. Beim Einschub in $[\bar{1}\bar{1}0]$ -Richtung geht bei $\phi_c = 1,23^\circ$ die axiale Führung in die planare Führung durch die (001)-Ebenen über. Wie sich dieser Übergang in den Ausbeuteprofilen widerspiegelt, sieht man in Abb. 6.5a-d. Die Ausbeuteprofile der Nickel-L₃VV-Auger-Elektronen sind für verschiedene Einschubwinkel ϕ bei Einschub entlang der $[\bar{1}\bar{1}0]$ -Richtung dargestellt.

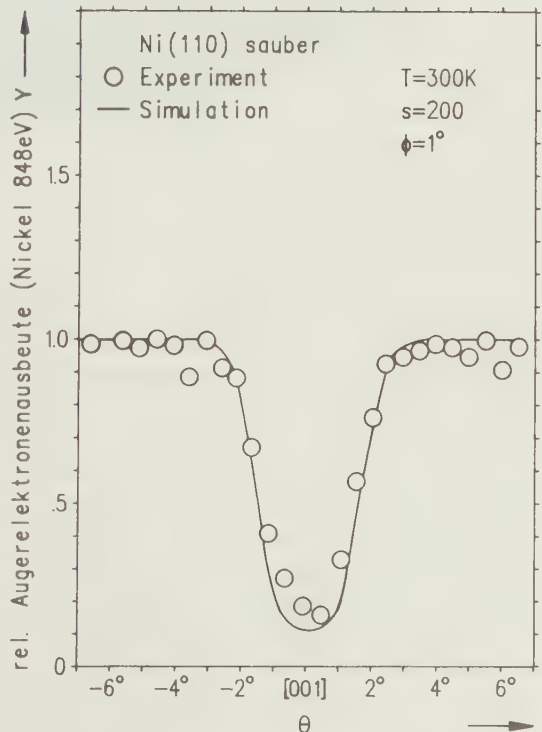
6.4.1. Axiale Oberflächen-Ionengitterführung

In den folgenden Experimenten und Computersimulationen zur Ionengitterführung wird die Ausbeute an Auger-Elektronen von einer Ni(110)-Oberfläche als Funktion des lateralen Einschubwinkels θ bei konstantem Einschubwinkel ϕ untersucht. Für axiale Oberflächen-Ionengitterführung (Surface Channeling) wählt man $\phi = 1^\circ$. Der laterale Winkel θ wird zur [001]-Richtung gemessen. Ein Ausbeuteprofil für Nickel-L₃VV-Auger-Elektronen (848eV), wie es eine saubere Ni(110)-Oberfläche bei Protonenbeschub entlang der [001]-Richtung liefert, ist in Abb. 6.6 zu sehen. Die Ausbeutekurve von Nickel-L₃VV-Auger-Elektronen weist ein tiefes und ausgeprägtes Minimum auf. Es hat eine Halbwertsbreite von $\theta_{1/2} = 1,7^\circ \pm 0,2^\circ$, was einem $\psi_{1/2}$ von 2° entspricht. Dieser Wert stimmt gut mit dem theoretischen Wert von $\psi_{1/2} = 2,1^\circ$ [23] bzw. $2,2^\circ$ [22] überein.

Das tiefe und ausgeprägte Minimum deutet darauf hin, daß der Ionenfluß bereits moduliert ist, wenn der Ionenstrahl auf die erste Atomlage trifft; moduliert, das heißt in diesem Zusammenhang: Erhöhung der Flußdichte zwischen den Atomketten und Flußdichtereduzierung am Ort der Atomketten. Projektile, die unter einem sehr kleinen Winkel zur Oberfläche einfallen (150keV H^+ unter $\phi = 1^\circ$) werden bereits in großem Abstand durch das Potential der Atomketten abgelenkt. Bei ihrem Auftreffen auf die obersten Atomlagen sind ihre Stoßparameter zu den Target-

atomen nicht mehr homogen verteilt, sondern die großen Stoßparameter sind stärker vertreten. Man kann diesen Prechanneling-Effekt in Computersimulationen studieren. Abb. 6.7a zeigt die Produktion $d\hat{Y}/dy$ an L_3VV -Auger-Elektronen als Funktion des lateralen Einschubwinkels θ und der Tiefe der Elektronenauslösung y . In der Auger-Elektronenproduktion $\hat{Y}$ ist die Austrittswahrscheinlichkeit $P_E(y)$ der erzeugten Auger-Elektronen noch nicht berücksichtigt (vgl. Abschnitt 4.6.1). Die erste Atomlage weist bereits ein sehr tiefes Minimum der Auger-Elektronenproduktion auf und bestätigt damit das Prechanneling. Die nächsten Atomlagen im oberflächennahen Bereich liefern nur einen geringen Beitrag zur Auger-Elektronenausbeute; den Beitrag noch tieferer Atomlagen kann man vernachlässigen.

Abb. 6.6: Ausbeute der Nickel- L_3VV -Auger-Elektronen (848eV) induziert von 150keV-Protonen als Funktion des lateralen Einschubwinkels θ bei axialer Oberflächen-Ionengitterführung ($\phi=1^\circ$). Die durchgezogene Linie ist das Ergebnis von Computersimulationen zu einer sauberen Ni(110)-Oberfläche mit einem Stufenabstand $s=200$ und einer Stufenhöhe von 0,25nm. Mittlere Austrittslänge der Auger-Elektronen $\lambda=1,5\text{nm}$.



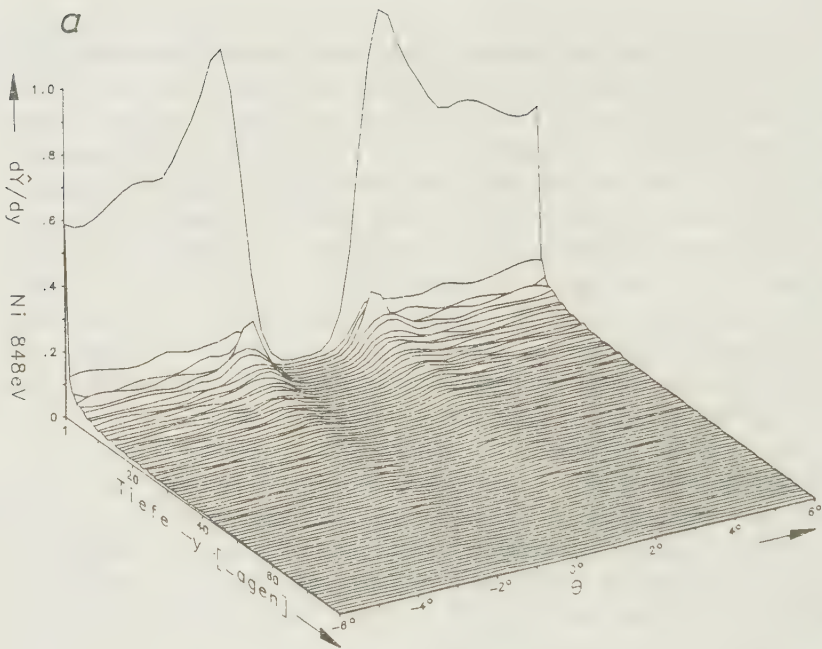
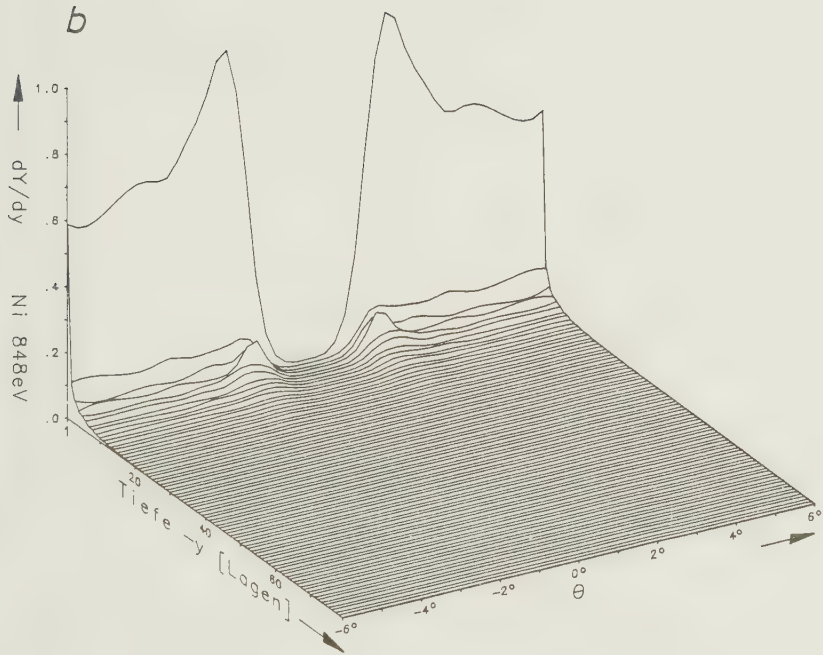


Abb. 6.7: (a) Produktion von Nickel- L_3VV -Auger-Elektronen $d\hat{Y}/dy$ als Funktion des lateralen Einschubwinkels θ und der Tiefe der Auger-Elektronenentstehung y . Induziert werden die Auger-Elektronen von 150keV-Protonen unter axialer Oberflächengitterführung ($\phi=1^\circ$). Der laterale Einschubwinkel θ ist auf die $[001]$ -Richtung bezogen. Der Tiefenbereich erstreckt sich in der Abbildung von der 1. Atomlage (=Oberfläche) bis zur 80. Atomlage; das entspricht einer Tiefe von 0 bis 20nm. Die Ergebnisse beruhen auf einer Computersimulation einer sauberen stufenfreien Ni(110)-Oberfläche. (b) Ausbeute von Nickel- L_3VV -Auger-Elektronen dY/dy als Funktion von θ und y . Diese Kurve entsteht aus der obigen Auger-Elektronenproduktion durch Gewichtung mit der Austrittswahrscheinlichkeit $P_E(y)$ ($\lambda=1,5\text{nm}$).



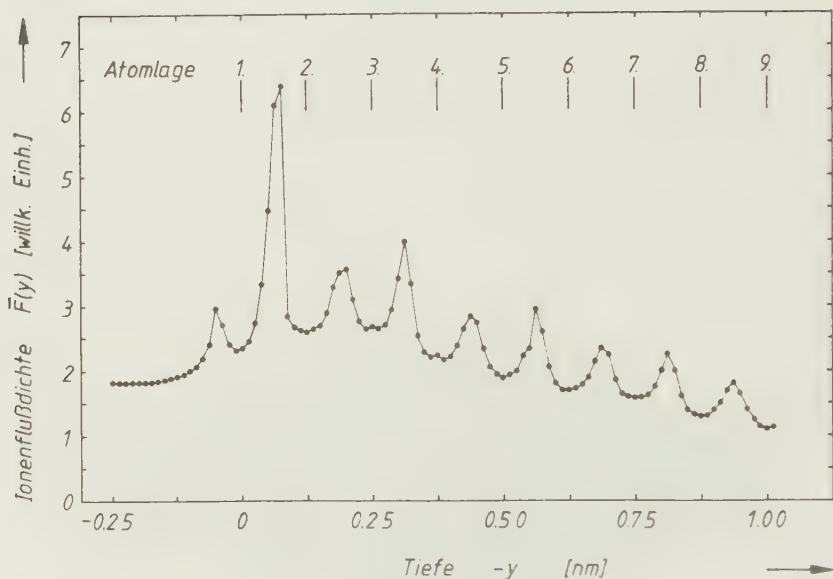


Abb. 6.8: Mittlere Ionenflußdichte $\bar{F}$ durch die (001)-Transversalebene in Abhängigkeit von der Tiefe y . Dem Ergebnis liegt eine Computersimulation zugrunde, in der eine saubere stufenfreie Ni(110)-Oberfläche unter $\phi=1^\circ$ und $\theta=0^\circ$ entlang der [001]-Richtung mit 150keV-Protonen beschossen wird. Gemittelt ist in x -Richtung über eine Einheitszelle.

Als Ergebnis einer Computersimulation ist in Abb. 6.8 die Tiefenabhängigkeit der mittleren Ionenflußdichte $\bar{F}(y)$ gegeben. Gemittelt wurde dabei in x -Richtung über eine Einheitszelle. Die Kurve dieser mittleren Flußdichte $\bar{F}(y)$ zeigt ein Maximum der Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Projektile unmittelbar unter der Oberfläche.

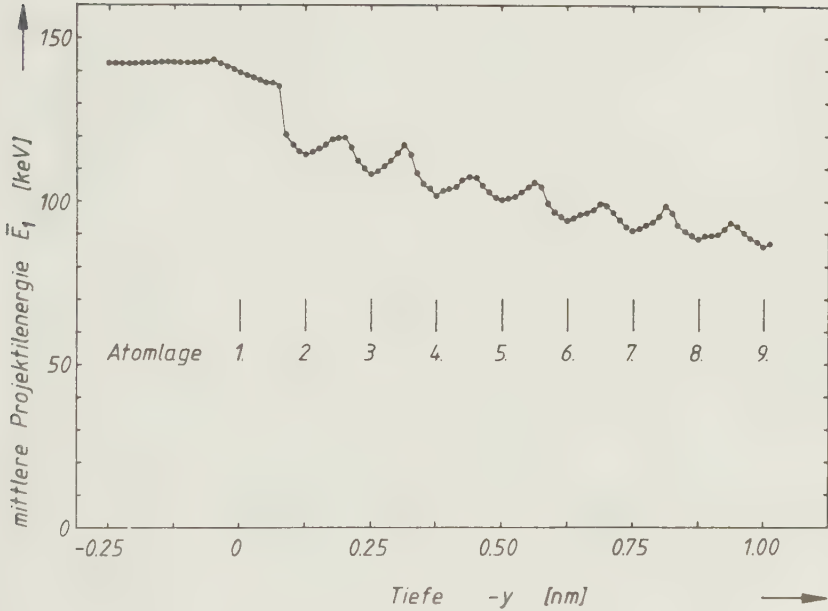
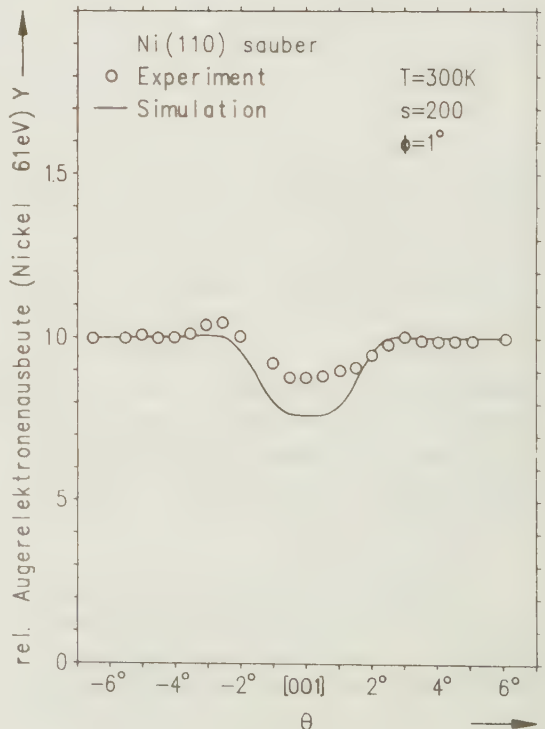


Abb. 6.9: Mittlere Projektilenergie $\bar{E}_1$ in Abhängigkeit von der Tiefe y . Dem Ergebnis liegt eine Computersimulation zugrunde, in der eine saubere stufenfreie Ni(110)-Oberfläche unter $\phi=1^\circ$ und $\theta=0^\circ$ entlang der $[001]$ -Richtung mit 150keV-Protonen beschossen wird. Gemittelt ist in x -Richtung über eine Einheitszelle. Da die eintretenden Projektile mit ihrer noch hohen Energie zwischen den Atomketten geführt werden und andererseits die abgebremsten Projektile mehr Großwinkelstreuungen - kleine Stoßparameter zu den Atomketten - absolvieren, kommt es zu den dargestellten Oszillationen der mittleren Projektilenergie.

Ebenfalls als Simulationsergebnis (H^+ , $E_1=150\text{keV}$, $\phi=1^\circ$, $\theta=0^\circ$) ist in Abb. 6.9 die mittlere Energie $\bar{E}_1$ der Projektile als Funktion der Tiefe y dargestellt. Die Protonen an der Oberfläche besitzen im Mittel eine höhere kinetische Energie als diejenigen, die tiefer eingedrungen sind. Wegen des sehr

flachen Einschubwinkels ϕ von 1° legen die Projektile große Strecken im Kristall zurück, um nur wenige Atomlagen tiefer zu gelangen. Der Energieverlust der Protonen ist unter diesen Umständen durchaus von Bedeutung, denn die Auger-Elektronenproduktion $\hat{Y}$, genauer der Wirkungsquerschnitt für die Ionisation innerer Schalen, nimmt etwa exponentiell mit der Projektilenergie E_1 ab (z.B. für die Ionisation der Nickel-L₃-Schale durch 150keV H⁺ beträgt $\sigma_{I(\text{Ion})}=2,8 \cdot 10^{-20} \text{cm}^2$, bei 100keV H⁺ nur noch $\sigma_{I(\text{Ion})}=1,3 \cdot 10^{-20} \text{cm}^2$ (vgl. Tabelle 4.1)). Es gibt also zwei Gründe für die starke Abnahme der Auger-Elektronenproduktion mit der Tiefe: Erstens die Verminderung der Flußdichte und zweitens die Abnahme der kinetischen Energie der Protonen mit der Eindringtiefe.

Abb. 6.10: Ausbeute von Nickel-M₂₃VV-Auger-Elektronen (61eV) induziert durch 150keV-Protonen als Funktion des lateralen Einschubwinkels θ bei axialer Oberflächen-Ionengitterführung ($\phi=1^\circ$). Die übrigen Parameter sind identisch mit Abb. 6.6; lediglich für die mittlere Austrittslänge wurde in dieser Simulation $\lambda=0,4\text{nm}$ gewählt.



Zusätzlich wird die Oberflächenempfindlichkeit der Methode noch durch die kurze mittlere Austrittslänge der ausgelösten Elektronen verstärkt. Sie beträgt $\lambda=1,5\text{nm}$ für Elektronen mit einer Energie von $E_e=848\text{eV}$ und $0,4\text{nm}$ für $E_e=61\text{eV}$. Gewichtet man die Auger-Elektronenproduktion mit der Austrittswahrscheinlichkeit $P_E(y)$, so resultiert eine Tiefenverteilung der Auger-Elektronenausbeute dY/dy , wie in Abb. 6.7b dargestellt.

Simultan mit den Nickel- $L_3\text{VV}$ -Auger-Elektronen ist auch das Ausbeuteprofil von Nickel- $M_{23}\text{VV}$ -Auger-Elektronen ($E_{M_{23}\text{VV}}=61\text{eV}$) gemessen worden (vgl. Abb. 6.10). Hier hebt sich das Ausbeuteminimum weniger deutlich vom Randomwert ab. Das unterschiedliche Verhalten der Ausbeuteprofile von Nickel- $L_3\text{VV}$ -Auger-Elektronen und Nickel- $M_{23}\text{VV}$ -Auger-Elektronen kann man leicht verstehen, wenn man den Anregungsprozeß der Auger-Elektronen, d.h. die Ionisationswahrscheinlichkeitsfunktion der L_3 - und M_{23} -Schale, vergleicht. Denn die Flußdichteverteilung der Ionen ist für beide Ausbeuteprofile dieselbe, der Ionisationsprozeß als Auslöser der Auger-Elektronenproduktion jedoch unterschiedlich. Vernachlässigt man die Verschiebung von Löchern (vgl. Abschnitt 4.2.3), dann stammen die $L_3\text{VV}$ -Auger-Elektronen vom Auffüllen der Löcher der L_3 -Schale ($2p_{3/2}$), die $M_{23}\text{VV}$ -Auger-Elektronen vom Auffüllen der M_{23} -Schale ($3p$). Die verschiedenen Ausbeuteprofile der $L_3\text{VV}$ - und $M_{23}\text{VV}$ -Auger-Elektronen werden von der unterschiedlichen Stoßparameterabhängigkeit der Ionisationswahrscheinlichkeit der L_3 - und der M_{23} -Schale bestimmt. Die Ionisationswahrscheinlichkeit der L_3 -Schale besitzt nur nahe dem Kern von Null verschiedene Werte. Die Ionisationswahrscheinlichkeitsfunktion der M_{23} -Schale hingegen ist ausgedehnter und erstreckt sich bis weit in den Kanal, der von den Atomketten begrenzt wird (vgl. Abb. 4.5). Selbst ein wohlgeführter Strahl von Ionen regt die Ausläufer der M_{23} -Schale noch an und erzeugt somit $M_{23}\text{VV}$ -Auger-Elektronen, wie das Ergebnis der Computersimulationen in Abb. 6.11a belegt. Dies ist der Grund dafür, daß die Produktion $\hat{Y}$ von Nickel- $M_{23}\text{VV}$ -Auger-Elektronen selbst dann noch hoch ist, wenn der Ionenstrahl parallel zu den Atomketten einfällt. Bezieht man die Austrittswahrscheinlichkeit P_E der

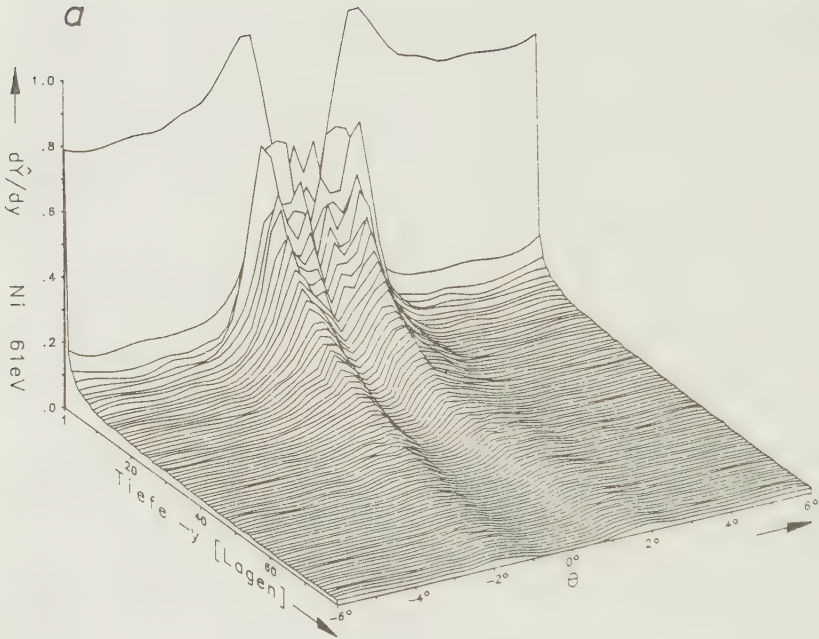
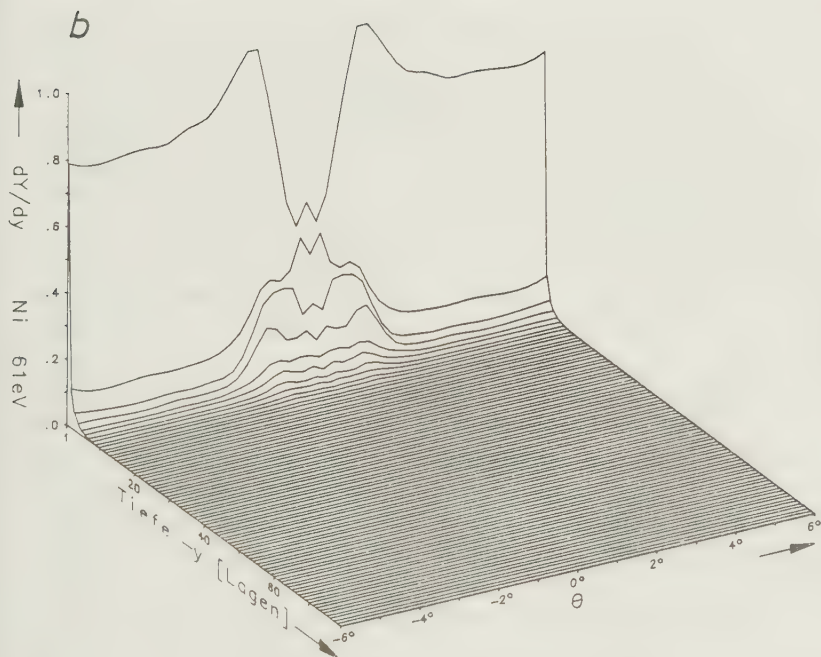


Abb. 6.11: (a) Produktion von Nickel-M₂₃VV-Auger-Elektronen $d\hat{Y}/dy$ als Funktion des lateralen Einschubwinkels θ und der Tiefe der Auger-Elektronenentstehung y . Induziert werden die Auger-Elektronen von 150keV-Protonen unter axialer Oberflächen-gitterführung ($\phi=1^\circ$). Der laterale Einschubwinkel θ ist auf die [001]-Richtung bezogen. Der Tiefenbereich erstreckt sich in der Abbildung von der 1. Atomlage (=Oberfläche) bis zur 80. Atomlage; das entspricht einer Tiefe von 0 bis 20nm. Die Ergebnisse beruhen auf einer Computersimulation einer sauberen stufenfreien Ni(110)-Oberfläche. (b) Ausbeute von Nickel-M₂₃VV-Auger-Elektronen dY/dy als Funktion von θ und y . Diese Kurve entsteht aus der obigen Auger-Elektronenproduktion durch Gewichtung mit der Austrittswahrscheinlichkeit $P_E\{y\}$ ($\lambda=0,4\text{nm}$).



erzeugten $M_{23}VV$ -Auger-Elektronen mit $\lambda(E_{M_{23}VV}=61\text{eV})=0,4\text{nm}$ in die Rechnung ein, so ist der Beitrag der im Kristallinneren geführten Ionen immer noch deutlich sichtbar (vgl. Abb. 6.11b).

Man kann den Unterschied zwischen beiden Auger-Elektronen-ausbeuteprofilen auch anhand der verschiedenen adiabatischen Abstände der Ionisationsprozesse erklären (vgl. Abschnitt 4.7.2). Der adiabatische Abstand für die Ionisation der M_{23} -Schale ($E_{M_{23}}=68\text{eV}$) durch 150keV -Protonen beträgt 52pm und ist damit beträchtlich größer als der minimale Abstand r_C von 9pm für Protonengitterführung entlang der $[001]$ -Richtung. Dies bedeutet, daß sogar wohlgeführte Protonen mit einem Abstand von den Atomketten von $r_C < r$ aber $r < r_{ad}$ die $M_{23}VV$ -Auger-Elektronen erzeugen können. Die L_3 -Schale mit $E_{L_3}=855\text{eV}$ kann nur von den Protonen spürbar angeregt werden, die nicht mehr geführt werden (aufgestreute Projektile), da der adiabatische Abstand $r_{ad}=4\text{pm}$

kleiner als der kritische Abstand $r_c = 9 \text{ pm}$ ist.

Die Ausbeuteprofile für $L_3\text{VV}$ - und $M_{23}\text{VV}$ -Auger-Elektronen wurden in Computersimulationen berechnet. Die Ergebnisse sind in Abb. 6.6 bzw. 6.10 als durchgezogene Linien dargestellt. In den Simulationen wird eine mittlere Austrittslänge λ von $1,5 \text{ nm}$ für die $L_3\text{VV}$ -Auger-Elektronen und von $0,4 \text{ nm}$ für $M_{23}\text{VV}$ -Auger-Elektronen angenommen. Das Simulationsergebnis für die $L_3\text{VV}$ -Auger-Elektronen ist in guter Übereinstimmung mit den experimentellen Werten. Jedoch für die $M_{23}\text{VV}$ -Auger-Elektronen geben die berechneten Kurven nur die Tendenz des Experiments wieder.

Die Abweichungen lassen sich zum Teil darauf zurückführen, daß die mittlere Austrittslänge λ der $M_{23}\text{VV}$ -Auger-Elektronen noch kürzer ist als die angenommenen $0,4 \text{ nm}$ (vgl. Abb. 6.13 und dazugehörige Diskussion). Um die Simulationsergebnisse besser an die gemessene $M_{23}\text{VV}$ -Ausbeutekurve anzupassen, müßte die Ionisationswahrscheinlichkeit noch schwächer mit dem Stoßparameter abnehmen.

Die Vernachlässigung der Verschiebung der Löcher von der K-, L_1 -, L_2 -, L_3 - und M_1 -Schale zur M_{23} -Schale kann nicht die Ursache für die verbleibende Diskrepanz sein, denn sie führt zu einer Vertiefung des Ausbeuteminimums.

Die Ionisation durch ioneninduzierte Sekundärelektronen ist jedoch ein Reaktionskanal, der $M_{23}\text{VV}$ -Auger-Elektronen liefert und der eine schwächere Abhängigkeit vom Stoßparameter besitzt als die direkte Ionisation der M_{23} -Schale. Wie in Abschnitt 4.2.1. und 4.2.2. berechnet, beträgt der Wirkungsquerschnitt für die direkte Ionisation der M_{23} -Schale durch 150 keV -Protonen $\sigma_I(\text{Ion}) = 6,0 \cdot 10^{-18} \text{ cm}^2$ und für die Ionisation durch Sekundärelektronen der 150 keV -Protonen $\sigma_I(\text{SE}) = 1,0 \cdot 10^{-18} \text{ cm}^2$. Der Beitrag der Sekundärelektronen - er ist noch nicht in der Computersimulation enthalten - bewirkt eine zusätzliche Verschmierung des Ausbeuteminimums der $M_{23}\text{VV}$ -Auger-Elektronen und führt deshalb zu einer besseren Übereinstimmung von Simulation und Experiment. Auf die $L_3\text{VV}$ -Ausbeutekurve hat die Ionisation durch ioneninduzierte Sekundärelektronen keinen Einfluß.

6.4.2. Planare Ionengitterführung

Die Messungen bei planarer Gitterführung werden mit dem gleichen experimentellen Aufbau wie bei axialer Gitterführung durchgeführt. Lediglich der Wert des Einschubwinkels zur (110)-Oberfläche wird auf $\phi=4,5^\circ$ erhöht. Dieser Wert ist groß genug, um planare Gitterführung zu gewährleisten und axiale Gitterführung auszuschließen ($\phi_c=1,52^\circ$). Andererseits ist der Einschubwinkel aber auch klein genug, daß die Protonen hauptsächlich Targetatome im oberflächennahen Bereich anregen. Die gemessenen Ausbeuteprofile von Nickel-L₃VV- und M₂₃VV-Auger-Elektronen sind in Abb. 6.12 bzw. 6.13 wiedergegeben.

Abb. 6.12: Ausbeute von Nickel-L₃VV-Auger-Elektronen (848eV) induziert durch 150keV-Protonen als Funktion des lateralen Einschubwinkels θ bei planarer Ionengitterführung ($\phi=4,5^\circ$). Die durchgezogene Linie ist das Ergebnis von Computersimulationen einer sauberen stufenfreien Ni(110)-Oberfläche. Mittlere Austrittslänge der Auger-Elektronen $\lambda=1,5\text{nm}$. Eingetragen ist auch die Lage der dichtest besetzten Gitterebenen nach Gl. (6.7) und (6.8).

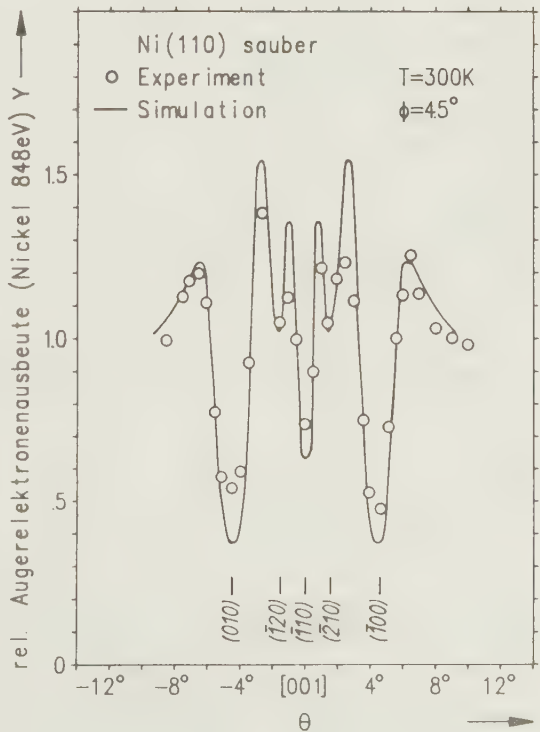
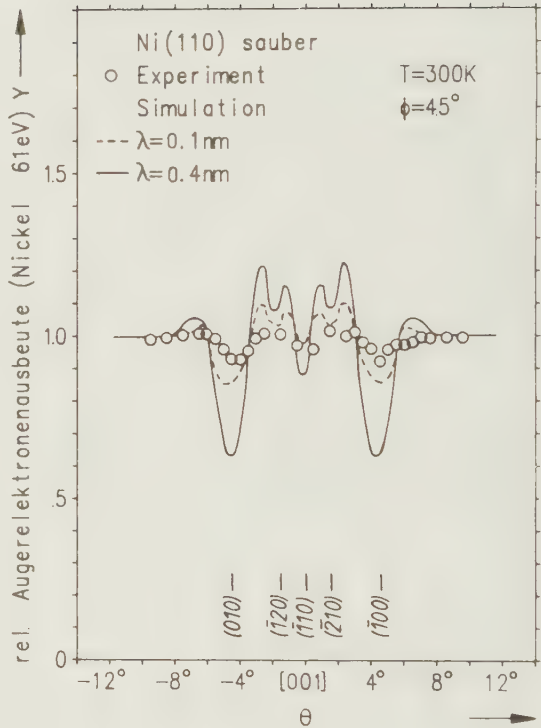


Abb. 6.13: Ausbeute von Nickel- $M_{23}VV$ -Auger-Elektronen (61eV) induziert durch 150keV-Protonen als Funktion des lateralen Einschubwinkels θ bei planarer Gitterführung ($\phi=4,5^\circ$). Die durchgezogene und die gestrichelte Linie sind das Ergebnis von Computersimulationen einer sauberen stufenfreien Ni(110)-Oberfläche. Mittlere Austrittslänge der Auger-Elektronen $\lambda=0,4\text{nm}$ bzw. $0,1\text{nm}$. Eingetragen ist auch die Lage der dichtest besetzten Gitterebenen nach Gl. (6.7) und (6.8).



Für den Einschub parallel zur niederindizierten Ebene (hkl) ergibt sich rechnerisch folgender lateraler Einschubwinkel (vgl. Abb. 6.14):

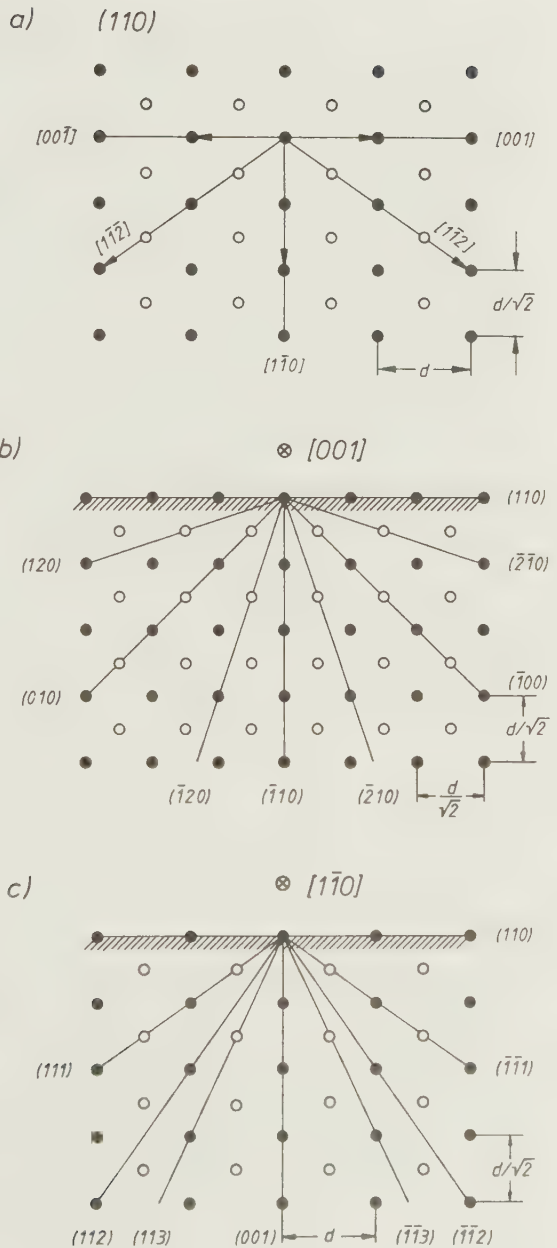
$$\Theta(hkl) = \phi \cot(\varphi(hkl)) \quad (6.7)$$

mit

$$\cos(\varphi(hkl)) = \frac{(h,k,l) \cdot (m,n,o)}{\sqrt{(h^2+k^2+l^2)(m^2+n^2+o^2)}} \quad (6.8)$$

wobei $\varphi(hkl)$ der Winkel zwischen der (hkl)-Ebene und der (m,n,o)-Oberfläche ist (hier (mno)=(110)).

Abb. 6.14: (a) Niederindizierte Richtungen in der (110)-Oberfläche eines fcc-Gitters; (b) Dichtest besetzte Ebenen beim Einschub entlang der [001]-Richtung; (c) Dichtest besetzte Ebenen beim Einschub entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung; (●) Gitteratome in der Schnittebene; (○) Gitteratome in der nächsten Ebene; (—) (110)-Oberfläche; Gitterkonstante von Nickel $d=0,352\text{nm}$.



Die Lage der Minima im Auger-Elektronenprofil ist in Übereinstimmung mit den oben berechneten Winkeln für die niederindizierten Gitterebenen. Die Ausbeuteprofile sowohl von Nickel- L_3VV - als auch von $M_{23}VV$ -Auger-Elektronen weisen Minima bei den $\{100\}$ - und $\{110\}$ -Ebenen auf. Doch die Ausbeute an Nickel- L_3VV -Auger-Elektronen zeigt viel tiefere Minima und läßt auch noch Minima für Protoneneinschuß entlang der $\{120\}$ -Ebenen erkennen, die kein so kräftiges Führungspotential besitzen. Der Grund für die unterschiedliche Θ -Abhängigkeit der L_3VV - und $M_{23}VV$ -Auger-Elektronenausbeute ist derselbe wie bei axialer Gitterführung, nämlich der Unterschied in der Stoßparameterabhängigkeit der L_3 - und M_{23} -Schale.

Die durchgezogenen Linien in Abb. 6.12 und 6.13 sind das Ergebnis von Computersimulationen. Dabei wird wiederum eine mittlere Austrittslänge λ von 1,5nm für die L_3VV - und 0,4nm für die $M_{23}VV$ -Auger-Elektronen angesetzt. Der Einschuwinkel ϕ beträgt $4,5^\circ$, die Einschußenergie der Projektile $E_1^{(0)} = 150\text{keV}$ und die Targettemperatur $T=300\text{K}$, wie im Experiment. Oberflächenstufen sind hier nicht in die Simulation einbezogen worden, da wegen des steileren Einschuwinkels ϕ nur wenige Projektile auf eine Stufenkante treffen.

Wie bei den Computersimulationen zur axialen Gitterführung ist auch im planaren Fall die Auger-Elektronenproduktion $d\hat{Y}/dy$ als Funktion des lateralen Einschuwinkels Θ und der Tiefe y berechnet worden. Abb. 6.15a und 6.16a zeigen die Computerergebnisse für L_3VV - bzw. $M_{23}VV$ -Auger-Elektronen. Die Abb. 6.15b und 6.16b beinhalten zusätzlich noch den Einfluß der Austrittswahrscheinlichkeit der Auger-Elektronen. Bei planarer Gitterführung mit einem Einschuwinkel von $\phi=4,5^\circ$ ist der Einfluß des Prechanneling weniger ausgeprägt als bei einem Winkel von $\phi=1^\circ$. Die Auger-Elektronenproduktion der ersten Atomlage weist nur schwache Minima auf. (In Abb. 6.15a und 6.16a sind die Minima zwar verdeckt, aber man kann das Profil der 1. Atomlage auch aus Abb. 6.15b und 6.16b entnehmen, da die Austrittswahrscheinlichkeit, mit der hier gewichtet wird, in der 1. Atomlage 1 ist.) Erst einige Atomlagen tiefer wird der

Einfluß der Gitterführung deutlicher. Das bedeutet, daß sich die starke Inhomogenität in der Ionenflußdichte erst innerhalb des Kristalls in tieferen Atomlagen entwickelt und deshalb die Θ -Abhängigkeit der Auger-Elektronenproduktion erst in tieferen Lagen hervortreten kann.

Die mittlere Austrittslänge λ bestimmt eine Gewichtsfunktion $P_E(y)$, die den Tiefenbereich festlegt, der zum Ausbeuteprofil $Y(\Theta)$ beiträgt. Ähnlich wie schon bei den Ergebnissen für axiale Gitterführung wird die Übereinstimmung zwischen gemessenen und gerechneten Ausbeuteprofilen der $M_{23}VV$ -Auger-Elektronen ($E_{M_{23}VV}=61\text{eV}$) besser, wenn man in der Simulation eine kürzere mittlere Austrittslänge λ ansetzt. In Abb. 6.13 ist für die gestrichelte Kurve $\lambda=0,1\text{nm}$ gewählt worden. Dieser Wert ist zwar wesentlich kleiner als die von Ertl und Küppers [48 S.7] zusammengetragenen Werte, doch Powell et al. [99] haben bei Untersuchungen der effektiven Austrittslänge mit protoneninduzierter Auger-Elektronenspektroskopie ebenfalls Hinweise auf kleinere mittlere Austrittslängen gefunden.

Wie bereits in der Diskussion der axialen Oberflächen-Ionen-gitterführung in Abschnitt 6.4.1 erwähnt, bewirkt auch hier der Beitrag ioneninduzierter Sekundärelektronen eine zusätzliche Glättung des Ausbeuteprofils der $M_{23}VV$ -Auger-Elektronen.

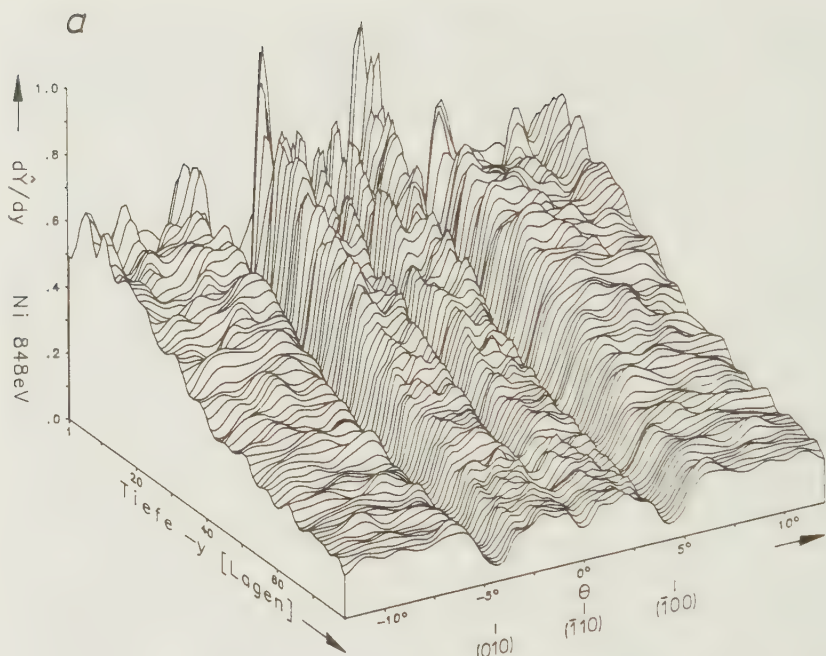
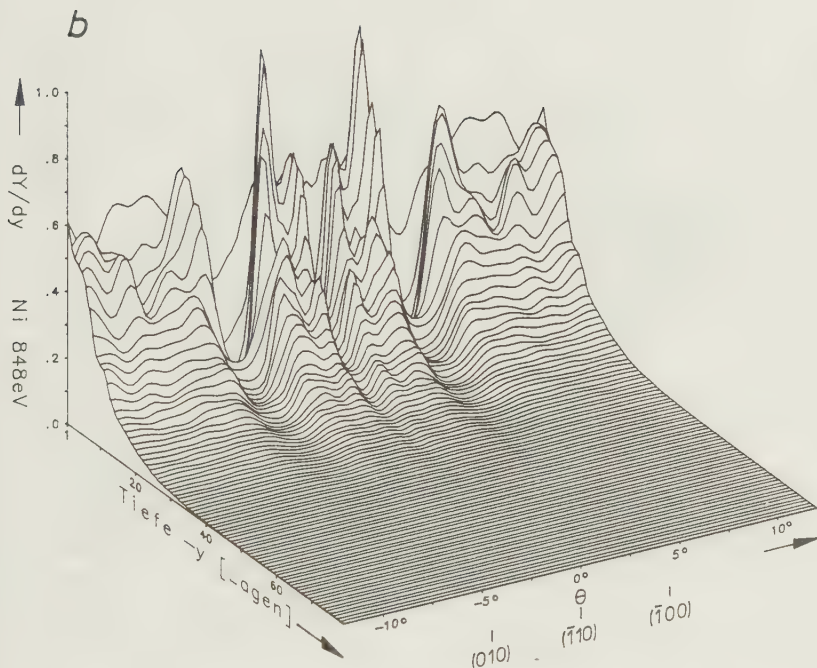


Abb. 6.15: (a) Produktion von Nickel- L_3VV -Auger-Elektronen $d\hat{Y}/dy$ als Funktion des lateralen Einschubwinkels θ und der Tiefe der Auger-Elektronenentstehung y . Induziert werden die Auger-Elektronen von 150keV-Protonen unter planarer Gitterführung ($\Phi=4,5^\circ$). Der laterale Einschubwinkel θ ist auf die $[001]$ -Richtung bezogen. Der Tiefenbereich erstreckt sich in der Abbildung von der 1. Atomlage (=Oberfläche) bis zur 80. Atomlage; das entspricht einer Tiefe von 0 bis 20nm. Die Ergebnisse beruhen auf einer Computersimulation einer sauberen stufenfreien Ni(110)-Oberfläche. (b) Ausbeute von Nickel- L_3VV -Auger-Elektronen dY/dy als Funktion von θ und y . Diese Kurve entsteht aus der obigen Auger-Elektronenproduktion durch Gewichtung mit der Austrittswahrscheinlichkeit $P_E(y)$ ($\lambda=1,5\text{nm}$).



Als Ergebnis dieses Abschnitts 6.4 kann man festhalten [60]: Bei axialer Oberflächen-Ionengitterführung regt der Ionenstrahl selektiv den oberflächennahen Bereich an. Zusätzlich wird der erfaßte Tiefenbereich noch eingengt durch die geringe mittlere Austrittslänge von Auger-Elektronen mit Energien E_{WXY} unter 1000 eV. Axiale Oberflächen-Ionengitterführung in Verbindung mit ioneninduzierter Auger-Elektronenspektroskopie bietet sich deshalb zur Oberflächenanalyse an. Die Halbwertsbreite des Ausbeuteminimums spiegelt die Struktur der obersten Atomlage wieder. Bei größeren Einschußwinkeln, z.B. bei planarer Gitterführung, ist diese Methode nicht mehr oberflächensensitiv. Der erfaßte Tiefenbereich wird dann allein von der mittleren Austrittslänge der betrachteten Auger-Elektronen bestimmt. Diese Einschußbedingungen könnten höchstens zur Untersuchung der Auger-Elektronenemission eingelagerter Fremdatome oder verdeckter Schichten dienen.

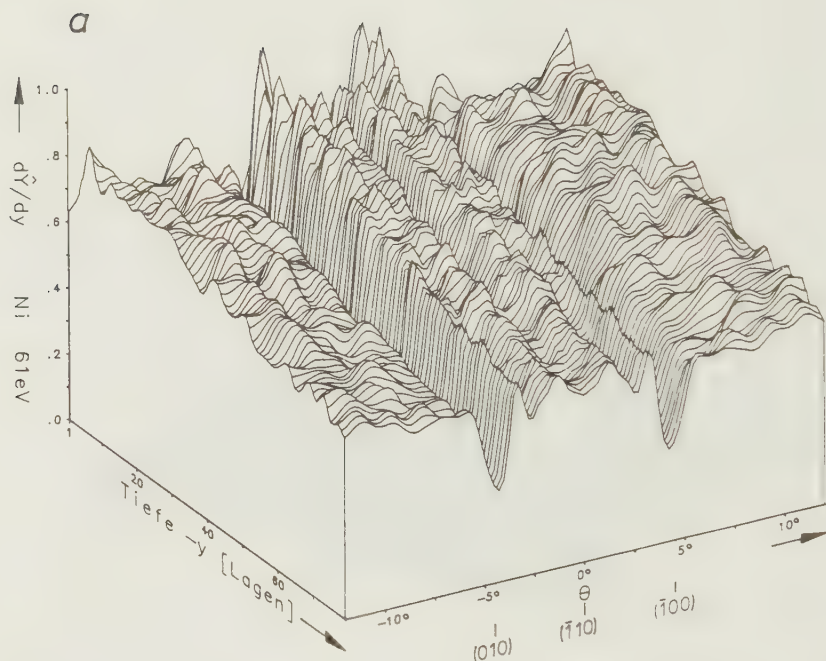
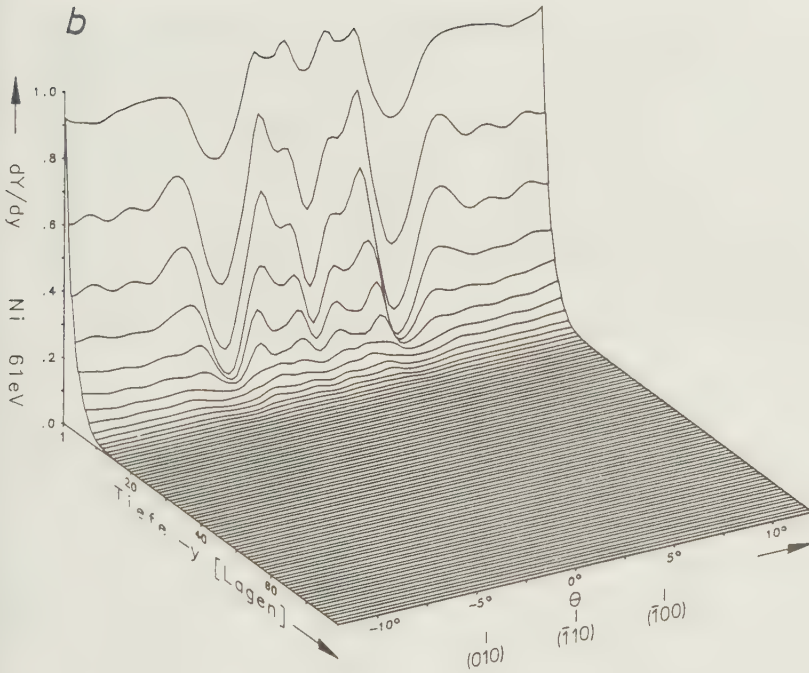


Abb. 6.16: (a) Produktion von Nickel-M₂₃VV-Auger-Elektronen $d\hat{Y}/dy$ als Funktion des lateralen Einschubwinkels θ und der Tiefe der Auger-Elektronenentstehung y . Induziert werden die Auger-Elektronen von 150keV-Protonen unter planarer Gitterführung ($\phi=4,5^\circ$). Der laterale Einschubwinkel θ ist auf die [001]-Richtung bezogen. Der Tiefenbereich erstreckt sich in der Abbildung von der 1. Atomlage (=Oberfläche) bis zur 80. Atomlage; das entspricht einer Tiefe von 0 bis 20nm. Die Ergebnisse beruhen auf einer Computersimulation einer sauberen stufenfreien Ni(110)-Oberfläche. (b) Ausbeute von Nickel-M₂₃VV-Auger-Elektronen dY/dy als Funktion von θ und y . Diese Kurve entsteht aus der obigen Auger-Elektronenproduktion durch Gewichtung mit der Austrittswahrscheinlichkeit $P_E(y)$ ($\lambda=0,4\text{nm}$).



6.5. Einflüsse auf die Ausbeuteprofile

In diesem Abschnitt wird der Einfluß der Ionisationswahrscheinlichkeitsfunktion, der thermischen Schwingungen, der mittleren Austrittslänge der freigesetzten Elektronen, der Oberflächenstufen und des Energieverlustes auf die Ausbeuteprofile mit Hilfe von Computersimulationen untersucht.

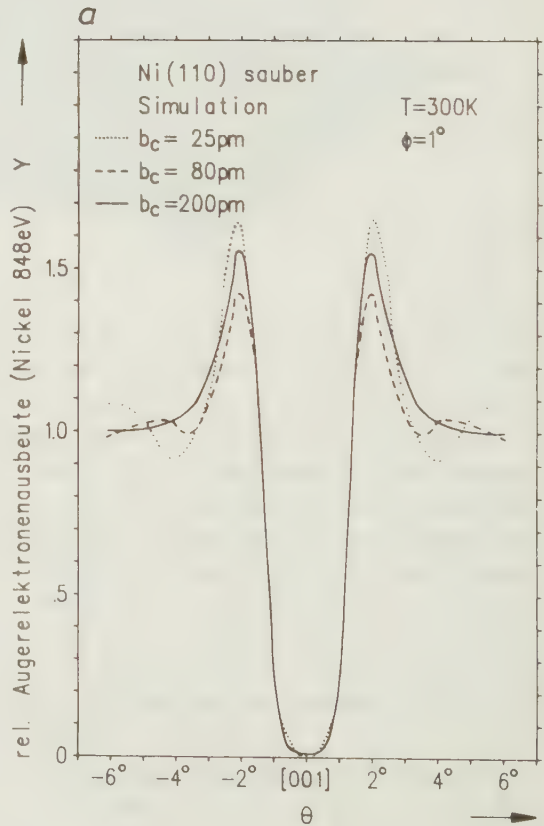
6.5.1. Abschneidestoßparameter

Die Ionisationswahrscheinlichkeit als Funktion der Projektilenergie E_1 und des Stoßparameters b ist im Computerprogramm

angesetzt worden, wie in Abschnitt 5.5 beschrieben. Der Definitionsbereich des Stoßparameters b erstreckt sich dabei von 0 bis 200pm.

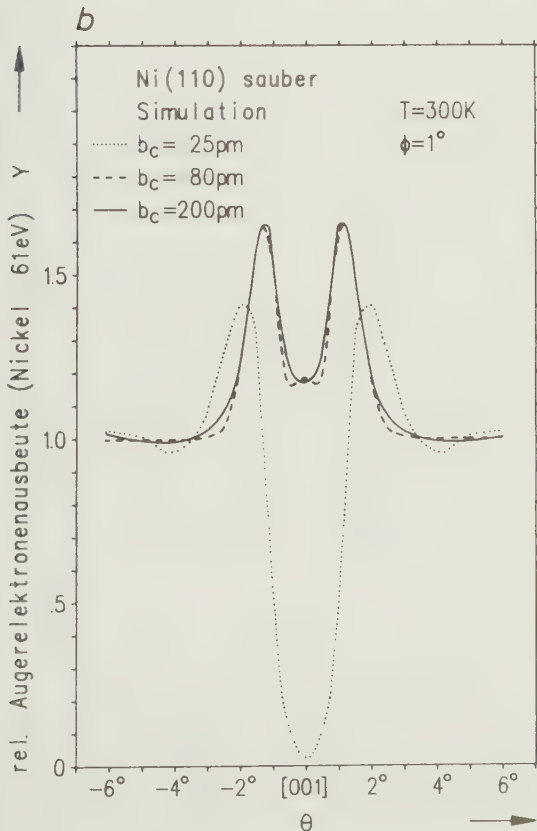
In der folgenden Diskussion wird der Stoßparameterbereich näher untersucht. Dazu schneidet man die Ionisationswahrscheinlichkeit bei einem Wert b_c ab. Für größere Werte als den sog. Abschneidestoßparameter b_c wird die Ionisationswahrscheinlichkeit gleich Null gesetzt. Die Ausbeuteprofile werden für Abschneidestoßparameter von 25pm, 80pm und 200pm berechnet (Abb. 6.17a und b), wobei alle übrigen Parameter unverändert bleiben.

Abb. 6.17: Einfluß des Stoßparameters b_c , bei dem die Ionisationswahrscheinlichkeitsfunktion $I(b)$ abgeschnitten wird, auf das Ausbeuteprofil (a) der Nickel- L_3 VV-Auger-Elektronen (848eV) und (b) der Nickel- M_{23} VV-Auger-Elektronen (61eV). In beiden Fällen werden 150keV-Protonen entlang der [001]-Richtung unter $\phi=1^\circ$ auf eine saubere stufenfreie Ni(110)-Oberfläche eingeschossen (axiale Oberflächen-Ionengitterführung).



Diese Untersuchung wird unter den Bedingungen der axialen Oberflächen-Ionengitterführung mit $\Phi=1^\circ$ durchgeführt. Für die Nickel- L_3 VV-Auger-Elektronen wird eine mittlere Austrittslänge von $\lambda=1,5\text{nm}$ angenommen, für die M_{23} VV-Auger-Elektronen $0,4\text{nm}$. Die thermischen Gitterschwingungen entsprechen einer Targettemperatur T von 300K . Um die Anzahl der Parameter klein zu halten, wurde eine stufenfreie Oberfläche zugrunde gelegt.

Die Simulationsergebnisse zeigen, daß das Ausbeuteprofil der L_3 VV-Auger-Elektronen nur geringfügig beeinflusst wird, wenn man die räumliche Ausdehnung der Ionisationswahrscheinlichkeits-



funktion im Bereich zwischen 25pm und 200pm variiert. Dieses Verhalten rührt daher, daß die Ionisationswahrscheinlichkeit der Nickel- L_3 -Schale bei einem Stoßparameter von 25pm bereits auf infinitesimale Werte abgesunken ist ($r_{ad}=4pm$). Weit ausgedehnte Ionisationswahrscheinlichkeitsfunktionen dagegen, z.B. der Nickel- M_{23} -Schale, reichen bis tief in den Kanal zwischen den Atomketten oder Atomebenen ($r_{ad}=52pm$). Das hat für den Nickel-[001]-Kanal zur Folge, daß die Ionisationswahrscheinlichkeit sogar in der Mitte des Kanals, der einen Durchmesser von 352pm besitzt, nicht verschwindet. In diesem Fall hängen die Ausbeuteprofile entscheidend vom Wert des Abschneidestoßparameters b_C ab. Ein Abschneidewert von $b_C=80pm$ liefert geringfügig tiefere Minima als ein Abschneidewert von 200pm (vgl. Abb. 6.17b). Wird hingegen die M_{23} -Ionisationswahrscheinlichkeitsfunktion bei $b_C=25pm$ abgeschnitten, einem Wert, der dem Abfall der L_3 -Ionisationswahrscheinlichkeitsfunktion entspricht, so ist die Änderung drastisch und die Ausbeuteprofile werden denen der L_3VV -Auger-Elektronen ähnlich. Die Simulationen beweisen, daß das unterschiedliche Aussehen der Ausbeutekurven für $M_{23}VV$ - und L_3VV -Auger-Elektronen den Unterschieden der M_{23} - und L_3 -Ionisationswahrscheinlichkeitsfunktionen zugeschrieben werden kann [60].

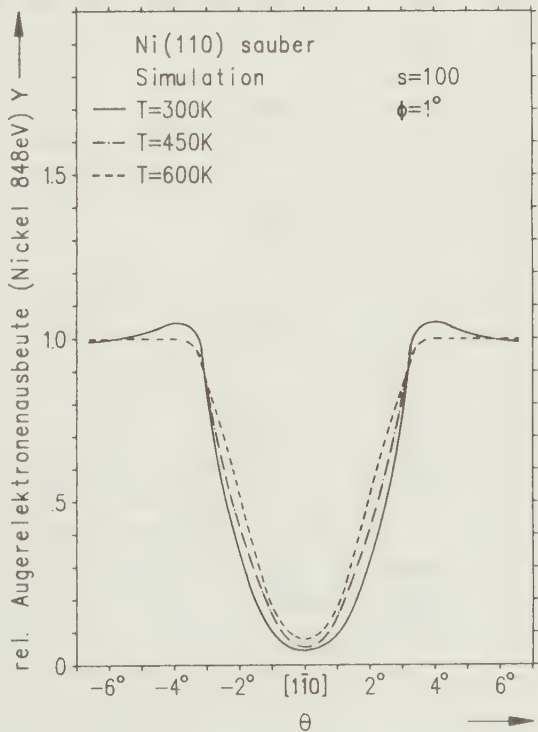
Darüberhinaus rechtfertigen die Ergebnisse im nachhinein die Festlegung des Abschneidewertes in den übrigen Simulationen auf $b_C=200pm$. Denn durch die Vernachlässigung der Ionisationswahrscheinlichkeit für Stoßparameter, die größer sind als dieser Wert, wird kein merklicher Fehler gemacht. Ähnliche Ergebnisse erhält man auch bei planarer Gitterführung mit $\Phi=4,5^\circ$.

6.5.2. Thermische Gitterschwingungen

Eine höhere Targettemperatur T hat zwei Effekte auf die Ausbeuteprofile von Auger-Elektronen. Weit ausgelenkte Targetatome verschmieren das zylindrische oder planare Führungs-

potential und verursachen eine homogenere Ionenflußdichte. Andererseits bewirkt eine ausgedehnte Verteilung von Targetatomen eine Verbreiterung der effektiven Ionisationswahrscheinlichkeitsfunktion (vgl. Abschnitt 4.6.2). Beide Effekte verschmieren das Ausbeuteprofil, das nach der Normierung auf den Randomwert ein erhöhtes Ausbeuteminimum zeigt. Zusätzlich macht die Schwächung des Führungspotentials der Atomketten und Atomebenen die halbe Halbwertsbreite $\theta_{1/2}$ schmaler. Insgesamt jedoch ist der Einfluß der Temperatur nicht gravierend [60, 100], wie man aus Abb. 6.18 ablesen kann.

Abb. 6.18: Einfluß der Targettemperatur T auf das Ausbeuteprofil der Nickel- L_3VV -Auger-Elektronen (848eV). Es werden 150keV-Protonen entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung unter $\phi=1^\circ$ auf eine saubere gestufte Ni(110)-Oberfläche eingeschossen (axiale Oberflächen-Ionengitterführung).



Die Ausbeuteprofile für axiale Gitterführung wurden für Targettemperaturen von 300K, 450K und 600K berechnet. Die Simulationsergebnisse für planare Gitterführung zeigen eine noch geringere Temperaturabhängigkeit. Dies hängt auch damit zusammen, daß die Projektile bei axialer Gitterführung länger im Bereich der ersten und zweiten Atomlage verweilen und deshalb länger den anomal großen Schwingungsamplituden dieser Atome ausgesetzt sind. Daneben ist, wie Barret [101] zeigen konnte, bei planarer Gitterführung ganz allgemein der Temperatureinfluß geringer als bei axialer Führung. Sollen die thermischen Schwingungen mitberücksichtigt werden, so muß man den Ausdruck (4.1) für die halbe Halbwertsbreite bei axialer Gitterführung erweitern zu [6, 101]:

$$\Psi_{1/2}^* = \kappa G_{RS}(\mu u_1/a_{TF}) \Psi_{1/2} \quad (6.9)$$

mit $\kappa=0,83$, $\mu=1,2$;

$$G_{RS}(\xi) = (g_{RS}(\xi))^{1/2} \quad (6.10)$$

$$g_{RS}(\xi) = \sum_{i=1}^3 \alpha_i K_0(\beta_i \xi) \quad (6.11)$$

$\alpha_i = (0,10; 0,55; 0,35);$

$\beta_i = (6,00; 1,20; 0,30);$

K_0 : Modifizierte Besselfunktion 2. Art 0. Ordnung;

u_1 : 1-dimensionale mittlere quadratische thermische Auslenkung;

$d_{a[hkl]}$: Atomabstand in der [hkl]-Führungskette.

Bei planarer Ionengitterführung beträgt die halbe Halbwertsbreite [6, 101]:

$$\psi_P^* = \kappa G_{PS}(\mu u_1 / a_{TF}, d_P(hkl) / a_{TF}) \psi_P \quad (6.12)$$

mit $\kappa=0,76$, $\mu=1,6$;

$$G_{PS}(\xi, \eta) = [g_{PS}(\xi) + g_{PS}(\eta - \xi) - 2g_{PS}(\eta/2)]^{1/2} \quad (6.13)$$

$$g_{PS}(\xi) = \sum_{i=1}^3 \frac{\alpha_i}{\beta_i} \exp(-\beta_i \xi) \quad (6.14)$$

$$\psi_P = (2\pi n_A z_1 z_2 e^2 a_{TF} / E_1)^{1/2} \quad (6.15)$$

n_A : Flächendichte der Atome in den Führungsebenen;

$d_P(hkl)$: Abstand der (hkl)-Führungsebenen.

Die Temperaturabhängigkeit wird allein von der Funktion G_{RS} bzw. G_{PS} beschrieben. Diese beiden Funktionen sind in Abb. 6.19 für axiale Gitterführung von Protonen in Nickel längs der $[1\bar{1}0]$ -Richtung und für planare Gitterführung zwischen den $\{110\}$ -Ebenen abgebildet, wobei für die thermische Auslenkung u_1 der Ausdruck (5.25) verwendet wird. Als Punkte sind außerdem die Werte eingetragen, die sich aus den eigenen Computersimulationen für Oberflächen-Ionengitterführung ergeben. Die Abweichung ist darauf zurückzuführen, daß an der Oberfläche die thermischen Schwingungen anomal groß sind.

Im Vergleich zur Rutherford-Rückstreuung (Rutherford Backscattering - RBS) wirkt sich bei Experimenten mit Ionengitterführung und ioneninduzierter Auger-Elektronenemission der Einfluß der Gitterschwingungen geringer aus. Der differentielle Wirkungsquerschnitt für die Rückstreuung von 150keV-Protonen durch Nickelatome von $d\sigma(\pi)/d\Omega=4,5 \cdot 10^{-24} \text{cm}^2/\text{sr}$ ist sehr klein verglichen mit dem Ionisationswirkungsquerschnitt. Würde man analog zur Ionisationswahrscheinlichkeitsfunktion eine Rückstreuungswahrscheinlichkeitsfunktion definieren, so hätte sie den

Charakter einer δ -Funktion. Nach der Faltung dieser Funktion mit der Verteilungsfunktion der Targetatome würde man eine effektive Rückstreuwahrscheinlichkeitsfunktion erhalten, die ausschließlich von der Verteilung der thermisch ausgelenkten Targetatome bestimmt wäre. Mit den Überlegungen in Abschnitt 4.6 wird deutlich, daß bei Ioneninduzierter Auger-Elektronenemission dieser Einfluß geringer sein muß, da die Ionisationswahrscheinlichkeiten selbst schon eine größere Breite besitzen.

Zu einem ähnlichen Ergebnis kommt man auch bei der Messung der Ioneninduzierten Röntgenemission [102], da ihr dieselbe Ionisationswahrscheinlichkeitsfunktion zugrunde liegt, wie der Ioneninduzierten Auger-Elektronenemission.

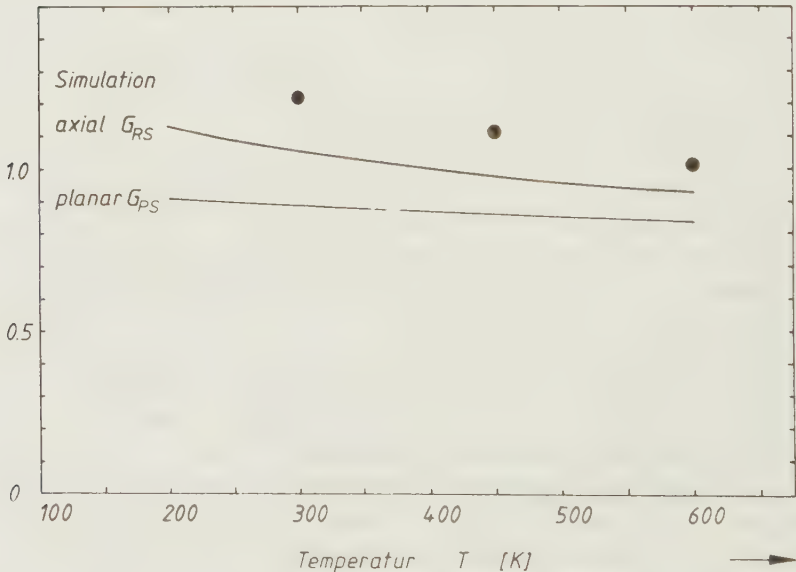


Abb. 6.19: Temperaturabhängigkeit der Halbwertsbreite der Ausbeuteprofile, beschrieben durch die Funktionen G_{RS} für axiale Gitterführung und G_{PS} für planare Gitterführung nach Gl. (6.10) bzw. (6.13). Simulationsergebnisse für axiale Oberflächen-Ionengitterführung sind durch Punkte gekennzeichnet.

6.5.3. Mittlere Austrittslänge der Elektronen

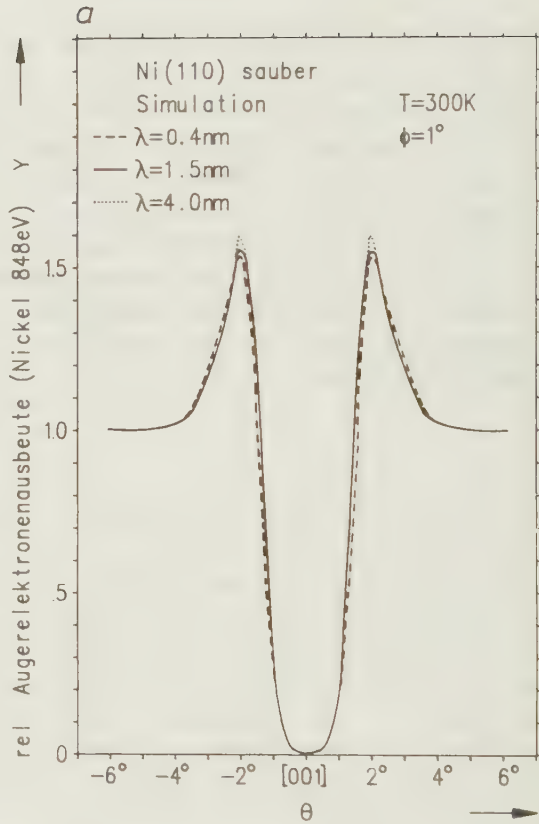
Die Wahrscheinlichkeit eines Auger-Elektrons, aus dem Kristall ohne Energieverlust auszutreten, hängt von der Tiefe ab, in der es freigesetzt wird, und von seiner Energie (vgl. Abschnitt 4.5). Bei der Berechnung der Auger-Elektronenausbeute durch Integration über die Auger-Elektronenproduktion aller Atomlagen wird mit der Austrittswahrscheinlichkeit $P_E(y)$ gewichtet. Wegen des exponentiellen Abfalls der Gewichtsfunktion $P_E(y)$ legt die mittlere Austrittslänge λ die maximale Nachweistiefe fest.

6.5.3.1. Axiale Oberflächen-Ionengitterführung

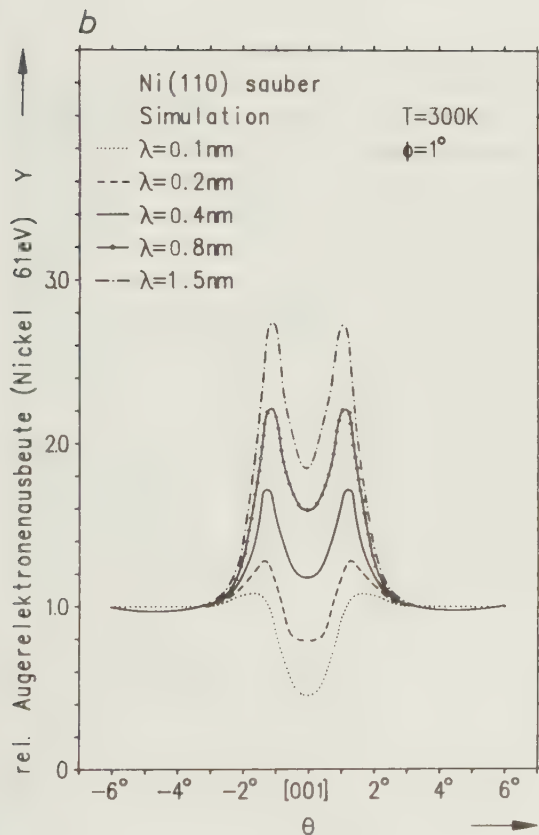
Das Ausbeuteprofil der Nickel- L_3VV -Auger-Elektronen, die von oberflächengeführten Protonen ($\Phi=1^\circ$, $E_1=150\text{keV}$) angeregt werden, wird in dem weiten Bereich von $\lambda=0,1\text{nm}$ bis $\lambda=10\text{nm}$ von der Wahl der mittleren Austrittslänge λ nur unmerklich beeinflusst (vgl. Abb. 6.20a). Im Gegensatz dazu hängt die Ausbeute von Nickel- $M_{23}VV$ -Auger-Elektronen stark von der mittleren Austrittslänge λ ab, insbesondere im Bereich zwischen $0,1\text{nm}$ und $0,8\text{nm}$ (vgl. Abb. 6.20b).

Wenn das Ausbeuteprofil durch die Wahl der mittleren Austrittslänge λ nicht geändert wird, ist dies ein Zeichen dafür, daß die eigentliche Form des Profils der Auger-Elektronenproduktion $d\hat{Y}/dy$ mit der Tiefe gleich bleibt. Denn eine Variation von λ bedeutet, den Bereich der Integration über $d\hat{Y}/dy$ zu verändern. Bei der Anregung der L_3VV -Auger-Linie bleibt die eigentliche Form des Profils $d\hat{Y}/dy$ von der Tiefe y unbeeinflusst (vgl. Abb. 6.7a) und folglich zeigt auch das Ausbeuteprofil keine Abhängigkeit von λ . Im Falle der $M_{23}VV$ -Auger-Linie dagegen ist die Form des Profils von $d\hat{Y}/dy$ tiefenabhängig (vgl. Abb. 6.11a), was dann zur λ -Abhängigkeit des Auger-Elektronenausbeuteprofiles führt.

Abb. 6.20: Einfluß der mittleren Austrittslänge λ auf das Ausbeuteprofil (a) der Nickel- L_3 VV-Auger-Elektronen (848eV) und (b) der Nickel- M_{23} VV-Auger-Elektronen (61eV). In beiden Fällen werden 150keV-Protonen entlang der $[001]$ -Richtung unter $\phi=1^\circ$ auf eine saubere stufenfreie Ni(110)-Oberfläche eingeschossen (axiale Oberflächen-Ionengitterführung). Zusammenfallende Profile sind durch eine Linie repräsentiert; die Profile für $\lambda=0,1\text{nm}$ und $\lambda=10\text{nm}$ sind deshalb nicht mehr eingezeichnet.



Wo aber liegt der tiefere Grund für die Unterschiede in der Tiefenabhängigkeit der Auger-Elektronenproduktion? Die Ionenflußverteilung, die zur Anregung der L_3 VV- und M_{23} VV-Auger-Elektronen führt, ist dieselbe. Doch wegen der unterschiedlichen Stoßparameterabhängigkeit der Ionisation der L_3 - und der M_{23} -Schale reicht im Falle der L_3 -Schale die Qualität des Prechanneling bereits aus, daß die geführten Ionen die L_3 -Schale nicht mehr ionisieren können. Eine weitere Ionenflußüberhöhung in tieferen Lagen kann keine zusätzliche Abnahme des Ausbeuteminimums bringen, da die Ausbeute ohnehin sehr gering ist. Dagegen können die "vor"-geführten Ionen in einem gewissen



Maße immer noch die M_{23} -Schale ionisieren. Deshalb ändert sich die eigentliche Form des Profils der $M_{23}VV$ -Auger-Elektronenproduktion $d\hat{Y}/dy$ mit der Tiefe.

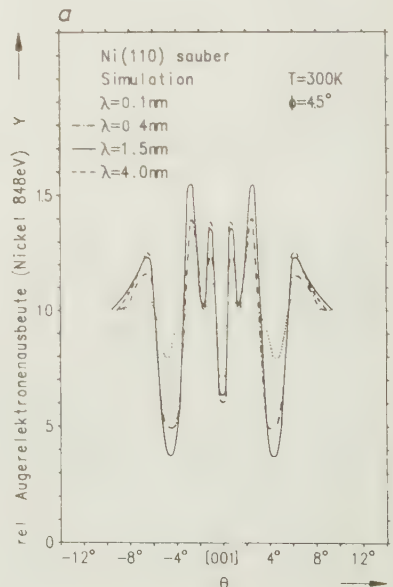
Die Ausbeuteprofile für verschiedene λ -Werte beweisen, daß nicht die mittlere Austrittslänge die Ursache für die unterschiedlichen Ausbeuteprofile der $L_{3}VV$ - und $M_{23}VV$ -Auger-Elektronen ist, sondern die unterschiedliche Ionisationswahrscheinlichkeitsfunktion $I(b)$ der L_3 - und M_{23} -Schale [60].

6.5.3.2. Planare Ionengitterführung

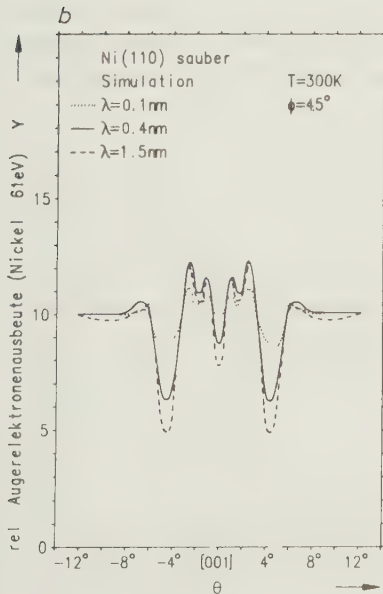
Bei planarer Gitterführung mit $\phi=4,5^\circ$ bleibt die eigentliche Form des Profils der L_3VV -Auger-Elektronenproduktion $d\hat{Y}/dy$ nicht unbeeinflusst von der Tiefe, wie bei axialer Oberflächengitterführung. Vielmehr ändert sich die eigentliche Form des Profils mit der Tiefe, da sich bei steilerem Einschub erst in tieferen Lagen die Gitterführung der Ionen entwickelt (vgl. Abb. 6.15a). Wie bereits in Abschnitt 6.5.3.1 erwähnt, bewirkt diese Tiefenabhängigkeit eine Abhängigkeit des integralen Ausbeuteprofils von der mittleren Austrittslänge λ (Abb. 6.21a und b).

Bei noch steilerem Ioneneinschub existiert überhaupt kein Prechanneling und erst innerhalb des Kristalls in tieferen Atomlagen entsteht eine Flußüberhöhung zwischen den Atomketten. Die Auger-Elektronenproduktion in den oberflächennahen Atomlagen wird dann keine Abhängigkeit vom lateralen Einschubwinkel aufweisen. Aus den tieferen Lagen, in denen die Auger-

Abb. 6.21: Einfluß der mittleren Austrittslänge λ auf das Ausbeuteprofil (a) der Nickel- L_3VV -Auger-Elektronen (848eV) und (b) der Nickel- $M_{23}VV$ -Auger-Elektronen (61eV). In beiden Fällen werden 150keV-Protonen entlang der [001]-Richtung unter $\phi=4,5^\circ$ auf eine saubere stufenfreie Ni(110)-Oberfläche eingeschossen (planare Oberflächen-Ionengitterführung).



Elektronenproduktion ein moduliertes Profil zeigt, können die Auger-Elektronen nur noch dann austreten, wenn ihre mittlere Austrittslänge groß genug ist. MacDonald et al. [103] schießen H^+ und He^+ -Ionen unter einem Winkel ϕ von 45° auf Si-, Ni- und Au-Einkristalloberflächen. Unter diesen Versuchsbedingungen ist die mittlere Austrittslänge λ für die Form des Auger-Elektronen-ausbeuteprofiles entscheidend. Der Wert von λ bestimmt das Verhältnis der Auger-Elektronenbeiträge aus oberflächennahen Atomlagen, die von einem noch nicht geführten Ionenfluß angeregt werden, zu den Auger-Elektronenbeiträgen tieferer Lagen, die von einem schon geführten Ionenfluß hervorgerufen werden. Da bei steilem Einschub in jedem Fall ein Auger-Elektronenbeitrag oberflächennaher Schichten vorliegt, in denen der Ionenfluß noch nicht durch die Gitterführung moduliert ist, sind die Ausbeuteminima nicht so tief wie bei streifendem Einschub (vgl. Abb. 6 in Ref. [103]).



6.5.4. Oberflächenstufen

Den Einfluß von Stufen in der Oberfläche zeigen die Simulationsergebnisse Abb. 6.22 am Beispiel einer sauberen Ni(110)-Oberfläche bei axialer Ionengitterführung längs der [001]-Richtung. Die Stufen bewirken eine Störung des Ionenflusses. Durch sie wird eine stark modulierte Flußdichteverteilung (vgl. Abb. 6.23a) wohlgeführter Ionen verschmiert (vgl. Abb. 6.23b). Um die Auswirkung von Oberflächenstufen zu zeigen, wurde die [001]-Einschußrichtung gewählt, da in dieser Richtung der Einfluß relativ stark ist. Die Größe s gibt die Anzahl der Netzebenen von Stufe zu Stufe an; $s=100$ bedeutet also, daß auf 100 transversale Atomebenen, was in [001]-Richtung eine Länge von 17,6nm ausmacht, eine Stufe der Höhe 0,25nm folgt. Die Höhe dieser Stufe entspricht zwei Netzebenenabständen. LEED-Untersuchungen an Nickel-(111)-Oberflächen haben gezeigt, daß bei Temperaturen um 750K Stufen mit einer Höhe von einem Netzebenenabstand vorliegen, während bei Raumtemperatur Stufen mit einer Höhe von zwei Netzebenenabständen dominieren [104]. Bei kleinen Einschußwinkeln ϕ und großen Stufenabständen $s \geq 100$ kann man sich darauf beschränken, Aufwärtsstufen zu simulieren, da im wesentlichen nur sie den Ionenfluß stören [71, 93]. Wie unter dem Einfluß der thermischen Schwingungen wächst das Ausbeuteminimum und nehmen die Schultern ab, wenn die Stufendichte groß wird, d.h. wenn s klein wird. Andererseits bewirkt eine hohe Stufendichte eine Verbreiterung der Ausbeuteprofile [100].

Wegen des steileren Ioneneinfalls haben Oberflächenstufen bei planarer Gitterführung einen kleineren Einfluß auf die Ausbeuteprofile.

Abb. 6.22: Einfluß des Stufenabstandes s auf das Ausbeuteprofil der Nickel-L₃VV-Auger-Elektronen (848eV) beim Einschub von 150keV-Protonen entlang der [001]-Richtung auf eine saubere Ni(110)-Oberfläche. s gibt den Abstand von Stufe zu Stufe in Einheiten von Transversalebene-abständen an. In [001]-Richtung entspricht $s=100$ einem Stufenabstand von 17,6nm; $s=\infty$ stellt eine stufenfreie Oberfläche dar. Alle Stufen sind Aufwärtstufen der Höhe 0,25nm.

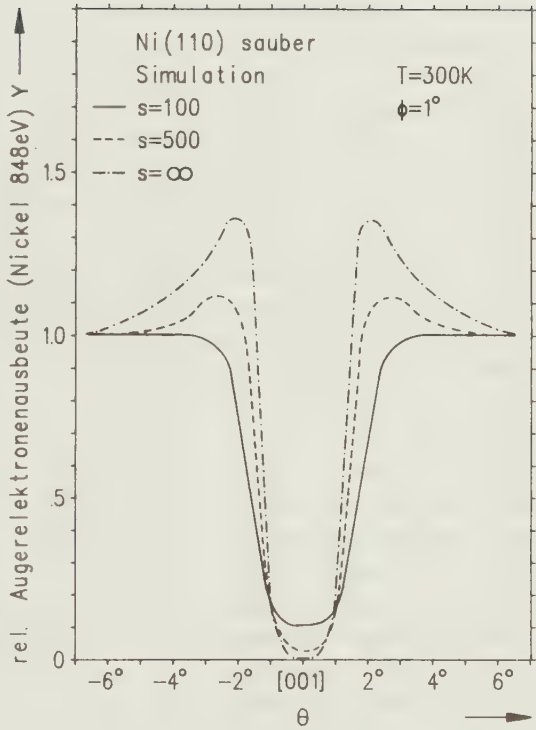


Abb. 6.23: Einfluß der Stufen auf die Flußdichteverteilung von 150keV-Protonen bei axialer Oberflächen-gitterführung entlang der $[001]$ -Richtung ($\phi=1^\circ$, $\theta=0^\circ$).

(a) saubere stufenfreie Ni(110)-Oberfläche $s=\infty$;
 (b) saubere Ni(110)-Oberfläche mit Aufwärtsstufen der Höhe 0,25nm im Abstand von $s=100$. Die Ergebnisse beruhen auf Computersimulationen, wobei eine saubere Ni(110)-Oberfläche zugrunde gelegt ist ($T=300K$, 80×40 Projektile). Die Flußdichte ist in Ebenen transversal zur $[001]$ -Richtung gemessen und jeweils auf die Flußdichte der einfallenden Projektile normiert (Gl. 5.31).
 (●) Position der Nickelatomketten; Gitterkonstante $d=0,352nm$.



6.5.5. Stoßparameterabhängigkeit des Energieverlustes

In den Computerrechnungen wird ein energieabhängiger, jedoch stoßparameterunabhängiger Energieverlust gemäß Abb. 5.5 zugrunde gelegt. Um zu prüfen, inwieweit diese Vereinfachung gerechtfertigt ist, wird zum Vergleich eine Simulation durchgeführt, bei der der elektronische Energieverlust zusätzlich noch vom Stoßparameter b abhängt. Die Stoßparameterabhängigkeit des Energieverlustes beschreibt ein Modell von Firsov [105], das allerdings nur gilt, wenn sich die Kernladungszahlen der Stoßpartner um weniger als den Faktor 4 unterscheiden. Eine für alle Systeme gültige Beziehung geben Oen und Robinson [106]:

$$\Delta \hat{E}_1(v_1, b) = \Delta E_1(v_1) \times \exp(-0,3b/a_{TF}). \quad (6.16)$$

$\Delta E_1(v_1)$ ist der stoßparameterunabhängige elektronische Energieverlust pro Stoß gemäß Abb. 5.5. Im Modell von Oen und Robinson wird der Energieverlust proportional zur Ladungsdichte des führenden Terms des Thomas-Fermi-Molière-Potentials angesetzt.

Die Normierungskonstante χ ist so bestimmt, daß sich bei Mittelung über alle vorkommenden Stoßparameter b der stoßparameterunabhängige Energieverlust $\Delta E_1(v_1)$ ergibt. Analog zu Graser [71] hat Winter [78] für verschiedene Gitterführungsrichtungen und die dazugehörigen Streuzellen die Normierungskonstanten numerisch ermittelt:

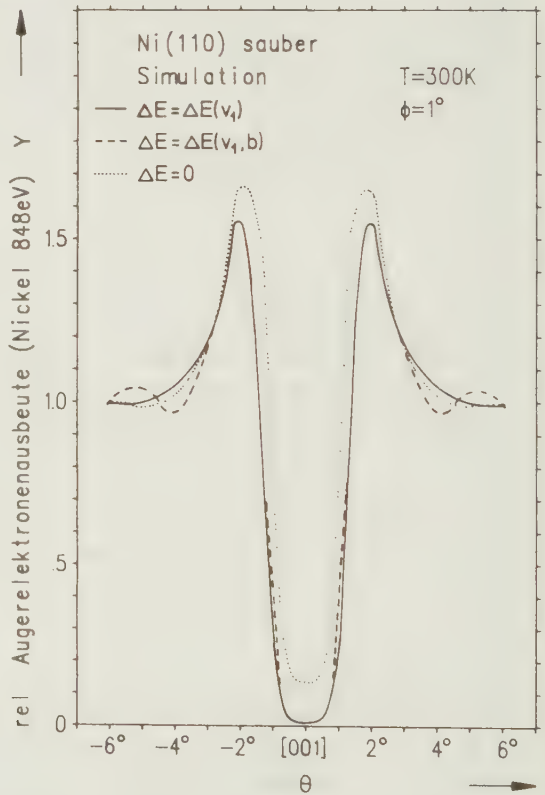
Richtung	$[1\bar{1}0]$	$[001]$
χ	6,53	5,02

In Abb. 6.24 werden Simulationsergebnisse für energieabhängigen Energieverlust $\Delta E_1(v_1)$ (durchgezogene Kurve) und für energie- und stoßparameterabhängigen Energieverlust $\Delta \hat{E}(v_1, b)$ nach Gl. (6.16) verglichen. Außer dem Ansatz für den Energieverlust sind sonst alle Parameter beider Simulationsrechnungen identisch. Beide Ausbeuteprofile sind deckungsgleich, wenn man von kleinen statistischen Schwankungen absieht.

Das Ausbeuteprofil der Nickel-L₃VV-Auger-Elektronen bei axialer Gitterführung entlang der [001]-Richtung ist hier als Beispiel gewählt, doch auch die entsprechenden Ausbeuteprofile der M₂₃VV-Auger-Elektronen weisen keine Unterschiede auf.

Dieses Ergebnis rechtfertigt den Ansatz eines stoßparameter-unabhängigen Energieverlustes in den Simulationsrechnungen.

Abb. 6.24: Einfluß des Energieverlustansatzes auf das Ausbeuteprofil der Nickel-L₃VV-Auger-Elektronen bei Einschub von 150keV-Protonen entlang der [001]-Richtung: Energieverlust nur energieabhängig (durchgezogene Kurve); Energieverlust energie- und stoßparameterabhängig (gestrichelte Kurve); ohne Energieverlust (gepunktete Kurve).



6.6. Einfluß der Bedeckung bei axialer und planarer Ionengitterführung

In Messungen und Simulationen werden eine saubere Ni(110)-(1x1)- sowie eine sauerstoffbedeckte O/Ni(110)-(2x1)-Oberfläche mit axialer und mit planarer Ionengitterführung untersucht. Die Präparation der sauberen Oberfläche ist in Abschnitt 3.1 beschrieben. Indem man die saubere Oberfläche einer Sauerstoffatmosphäre aussetzt ($2\text{Langmuir}=1,5\cdot 10^{-4}\text{Pa}\cdot\text{s O}_2$), wird die Oberfläche mit ca. 0,4 bis 0,5 Monolagen Sauerstoff bedeckt. LEED-Untersuchungen zeigen, daß diese Bedeckung einem (2x1)-Muster entspricht.

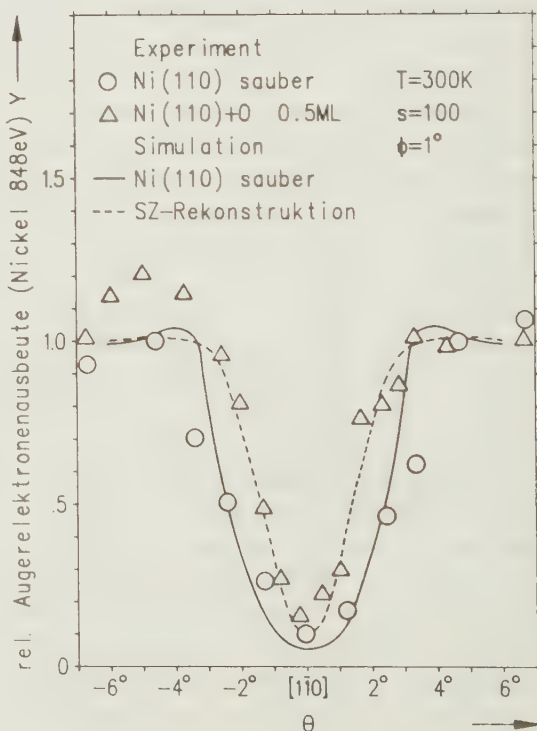
In Abb. 6.25 und 6.26 werden Ausbeuteprofile der Nickel-L₃VV-Auger-Elektronen bei 848eV vorgestellt, die durch den Einschub von Protonen in $[1\bar{1}0]$ -Richtung induziert werden. Der laterale Winkel Θ bezieht sich auf die $[1\bar{1}0]$ -Richtung. Der Einschubwinkel Φ beträgt 1° bei den Messungen der axialen Gitterführung und $4,5^\circ$ bei Messungen der planaren Gitterführung. Sowohl bei axialer als auch bei planarer Gitterführung geben die Kreise die Ausbeuten an, die bei Zimmertemperatur an einer sauberen Ni(110)-(1x1)-Oberfläche gemessen werden. Unter axialer Oberflächen-Ionengitterführung erhält man ein Ausbeuteprofil mit einer halben Halbwertsbreite von $\Theta_{1/2}=2,6^\circ$, analog einem $\Psi_{1/2}$ von $2,8^\circ$. Auch bei planarer Gitterführung ergeben sich ausgeprägte Ausbeuteminima, deren Lage mit den Winkeln $\Theta_{(hkl)}$ für die entsprechenden Führungsebenen übereinstimmt (vgl. Abb. 6.14c oder Gl. (6.10) und (6.11)). Die Ebenen mit den höchsten Atomdichten, wie die {111}- und {100}-Ebenen zeigen die tiefsten und breitesten Minima. Die {112}- und {113}-Ebenen weisen kleinere Minima auf.

Nach diesen Messungen wird die Oberfläche mit Sauerstoff bedeckt und das Experiment unter sonst identischen Bedingungen wie an der sauberen Oberfläche wiederholt. Das Ausbeuteprofil der Nickel-L₃VV-Auger-Elektronen gemessen an der sauerstoffbedeckten Oberfläche ist in Abb. 6.25 und 6.26 durch Dreiecke markiert. Bei axialer Gitterführung ändert sich das

Ausbeuteprofil drastisch. Die halbe Halbwertsbreite der Ausbeutekurve nimmt bei Sauerstoffbedeckung auf $\Theta_{1/2}=1,6^\circ$ ab, was einem $\Psi_{1/2}$ von $1,9^\circ$ entspricht. Der Winkel $\Psi_{1/2}$ der sauberen Ni(110)-Oberfläche verhält sich zu $\Psi_{1/2}$ der sauerstoffbedeckten Oberfläche wie $\sqrt{2}:1$. Dieser experimentelle Befund wird im Abschnitt 7.2 benutzt, um die Rekonstruktion der sauerstoffbedeckten O/Ni(110)-(2x1)-Oberfläche zu diskutieren. An dieser Stelle soll nur das empfindliche Ansprechen der axialen Gitterführung auf Rekonstruktionen der Oberfläche demonstriert werden.

Im Gegensatz dazu hat die Sauerstoffbedeckung bei planarer Gitterführung nahezu keinen Einfluß auf das Ausbeuteprofil. Die einzige Abweichung beobachtet man bei den Minima der {112}-

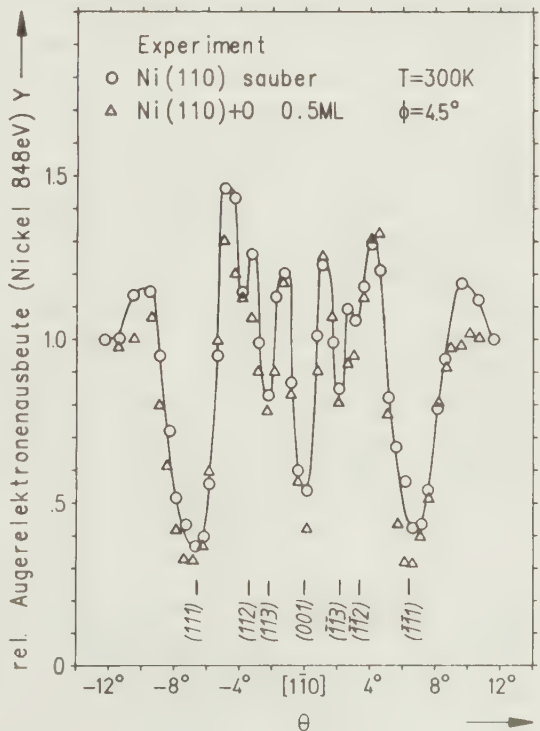
Abb. 6.25: Ausbeuteprofile der Nickel- L_3 VV-Auger-Elektronen (848eV) (o) der sauberen Ni(110)-Oberfläche und (Δ) der sauerstoffbedeckten Oberfläche bei Einschub von 150keV-Protonen entlang der $[\bar{1}\bar{1}0]$ -Richtung. Der Einschubwinkel ϕ beträgt 1° (axiale Oberflächen-Ionengitterführung). Die durchgezogene und die gestrichelte Linie sind die entsprechenden Simulationsergebnisse (vgl. Abschnitt 7.2).



Ebenen. Diese Minima verschwinden, während die Minima der benachbarten $\{113\}$ -Ebenen durch die Sauerstoffbedeckung etwas tiefer werden. Bis auf diese kleinen Unterschiede sind die Ausbeuteprofile der planaren Gitterführung für die saubere und die sauerstoffbedeckte Oberfläche nahezu deckungsgleich.

Zusammenfassend läßt sich daraus folgern, daß axiale Gitterführung bei streifendem Ioneneinfall (Oberflächen-Ionengitterführung) weit besser geeignet ist, Oberflächenrekonstruktionen und Adsorbate zu untersuchen als planare Gitterführung [60]. Planare Gitterführung könnte höchstens bei eingebetteten Fremdatomen und überdeckten Zwischenlagen eine erfolgversprechende Untersuchungsmöglichkeit darstellen.

Abb. 6.26: Ausbeuteprofile der Nickel- L_{3VV} -Auger-Elektronen (848eV) (o) der sauberen Ni(110)-Oberfläche und (Δ) der sauerstoffbedeckten Oberfläche bei Einschub von 150keV-Protonen entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung. Der Einschubwinkel ϕ beträgt $4,5^\circ$ (planare Ionen-gitterführung). Hier ist die durchgezogene Linie eine Ausgleichskurve zu den an der sauberen Oberfläche gemessenen Werten. Die Lage der dichtest besetzten Gitterebenen nach Gl. (6.7) und (6.8) ist eingetragen.



6.7. Strahlenschäden

Die einfallenden Ionen verlieren kinetische Energie durch elektronischen und durch nuklearen Energieverlust. Nur der nukleare Energieverlust bewirkt durch den elastischen Energieübertrag auf die Gitteratome Strahlenschäden, wie Versetzungen und Ionenzerstäuben der Substratatom sowie Desorption der Adsorbate. In Nickel beträgt der nukleare Energieverlust von 150keV-Protonen bei Randeinschuß im Mittel 0,4eV/nm [107]. Dabei wird in einem einzelnen Stoß Projektil-Targetatom die Energie $E_2 \cdot \sin^2 \vartheta_L$ übertragen, wenn man in Gl. (5.27) $m_1 \ll m_2$ und für das Projektil kleine Streuwinkel ϑ_L annimmt. Da die geführten Ionen im Mittel um kleinere Winkel gestreut werden als die ungeführten, ist bei den gittergeführten Projektilen der nukleare Energieverlust kleiner, nämlich nur noch 0,01eV/nm bei 150keV-Protonen in Nickel [5].

In Computersimulationen zur Protonenstreuung an Ni(110)-Oberflächen ist die Anzahl der Stöße als Funktion des jeweiligen Energieübertrags E_2 ermittelt worden (vgl. Abb. 6.27). Dazu sind 160x160 Projektilen von $E_1^{(0)} = 150\text{keV}$ entlang der [001]-Richtung unter $\phi = 1^\circ$ sowie $\theta = 0^\circ$ und 6° auf eine saubere Ni(110)-Oberfläche eingeschossen worden. Die Kurve für $\theta = 0^\circ$ folgt über 12 Dekaden dem E_2^{-2} -Verlauf der Rutherford-Streuung. Lediglich um ca. einen Faktor 30 ist die Zahl der Energieüberträge bei Gitterführung kleiner als die Rutherford-Formel Gl. (4.8) angibt. Genauer wird die Streuung der Protonen im Energiebereich um 150keV vom Thomas-Fermi-Molière-Potential beschrieben. Der Unterschied der Rutherford-Formel zum differentiellen Wirkungsquerschnitt des Thomas-Fermi-Molière-Potentials

$$\frac{d\sigma}{dE_2} = \left[\sum_{i=1}^3 \frac{1}{E_2 + \frac{\hbar^2 \beta_i^2}{2 m_2 a_{TF}^2}} \right]^2 \cdot \frac{Z_1^2 Z_2^2 e^4}{\frac{m_2}{m_1} E_1} \quad (6.17)$$

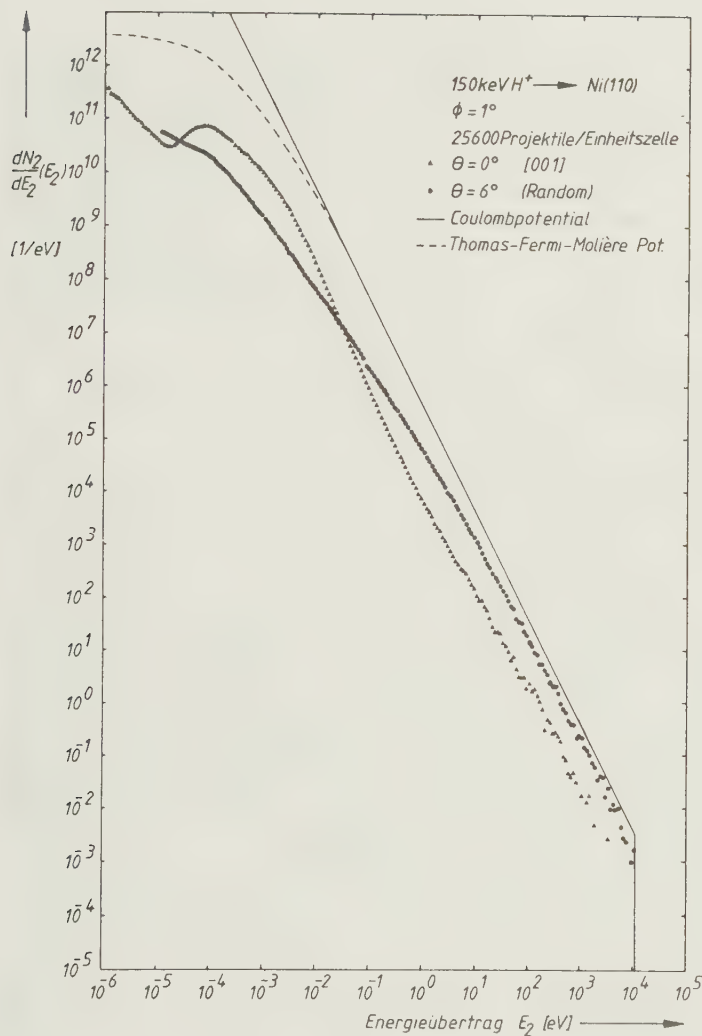


Abb. 6.27: Anzahl der Energieüberträge dN_2 pro Energieintervall dE_2 bei Einschub von 150keV -Protonen auf eine saubere $\text{Ni}(110)$ -Oberfläche (Δ) entlang der $[001]$ -Richtung ($\theta=0^\circ$) und ($\bullet$) in Randomrichtung ($\theta=6^\circ$) (160×160 Projektile, $\phi=1^\circ$, stufenfreie Oberfläche). Die eingezeichneten Kurven ergeben sich aus den differentiellen Wirkungsquerschnitten für das Coulombpotential bzw. das Thomas-Fermi-Molière-Potential.

macht sich aber erst bei Energieüberträgen $E_2 < 5,6 \cdot 10^{-2} \text{eV}$ bemerkbar. Die in Abb. 6.27 eingezeichneten Kurven, die sich aus den differentiellen Wirkungsquerschnitten $d\sigma/dE_2$ nach Gl. (4.8) bzw. (6.17) ergeben, gelten für Stöße von 150keV-Protonen mit Nickelatomen. In den Simulationsrechnungen zu Abb. 6.27 sind aber aufgrund des Energieverlustes alle Projektilenergien $5 \text{keV} < E_1 \leq 150 \text{keV}$ vertreten. Es hat sich jedoch in Computersimulationen gezeigt, daß die Verteilung der Energieüberträge $(dN_2/dE_2)(E_2)$ in Rechnungen ohne Energieverlust ($E_1 = E_1^{(0)} = 150 \text{keV}$) unwesentlich von den Ergebnissen in Abb. 6.27 abweicht.

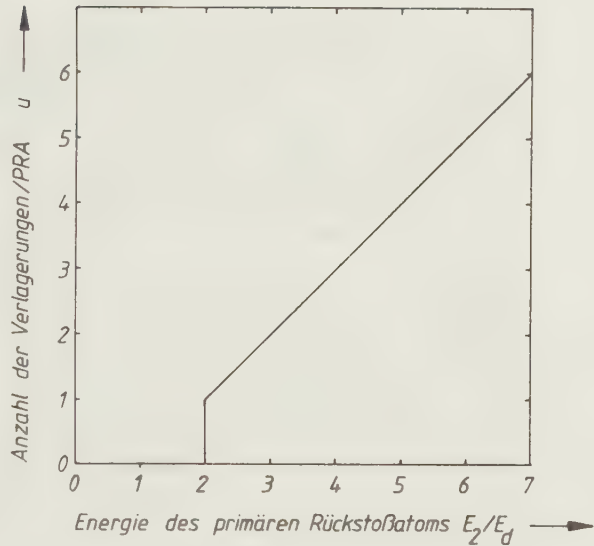
Die Defekterzeugung durch die einfallenden Ionen kann man sich als mehrstufigen Prozeß vorstellen [108, 109]. Im ersten Schritt überträgt das Projektil beim Stoß die Energie E_2 auf ein Gitteratom und erzeugt gegebenenfalls ein primäres Rückstoßatom (PRA). Im zweiten Schritt kann das PRA eine weitere Verlagerung von Gitteratomen oder ganze Versetzungskaskaden auslösen (vgl. Abb. 6.28). In den anschließenden Phasen folgen Energiedissipation und Defektreaktionen. Dabei können versetzte Gitteratome wieder in Gitterplätze relaxieren oder auch stabile Defekte bilden. Damit stabile Frenkeldefekte entstehen, ist ein Energieübertrag $E_2 > 2E_d$ nötig. Bei Nickel beträgt die Verlagerungsenergie $E_d = 24 \text{eV}$ im Kristallinneren [110]. Für die Zahl der stabilen Verlagerungen u , die ein PRA der Energie E_2 erzeugt, wurde, in Anlehnung an das Modell von Kinchin und Pease [111], ein Modell nach Abb. 6.28 angenommen.

Die Verlagerungsrate U , also die Gesamtzahl der Verlagerungen pro einfallendes Projektil, ergibt sich aus:

$$U = \frac{1}{N_1} \int_0^{\infty} u(E_2) \frac{dN_2}{dE_2}(E_2) dE_2. \quad (6.18)$$

Mit den Ergebnissen der Simulation aus Abb. 6.27 erhält man eine Verlagerungsrate $U = 0,08 \text{dpa}$ (dpa - displacements per atom) beim Einschub von 150keV-Protonen in Gitterführungsrichtung ($\phi = 1^\circ$, $\theta = 0^\circ$) und $U = 0,8 \text{dpa}$ beim Einschub in Randomrichtung ($\phi = 1^\circ$, $\theta = 6^\circ$).

Abb. 6.28: Modellannahme für die Anzahl der stabilen Verlagerungen pro primäres Rückstoßatom als Funktion des Energieübertrags E_2 . Die Verlagerungsenergie E_d beträgt in Nickel 24eV [110].



Außer der Verteilung der Energieüberträge auf die Rückstoßatome ist mit Hilfe der Computersimulation darüberhinaus eine tiefenaufgelöste Energieverteilung ermittelt worden; d.h. die Anzahl der Energieüberträge ist sowohl in Abhängigkeit der übertragenen Energie E_2 als auch der Tiefe y , in der sich der Stoß ereignet hat, erfaßt worden. Eine Abschätzung der Zerstäubungsrate unter streifendem Einschub $\Phi=1^\circ$ läßt sich angeben, wenn man annimmt, daß nur die Nickelatome der obersten beiden Atomlagen weggeschossen werden können, denen eine höhere Energie übertragen wurde als die Kohäsionsenergie von 4,44eV [112]. Unter diesen Voraussetzungen liefern Computerrechnungen (150keV H^+ auf O/Ni(110)-(2x1)-Oberfläche mit Sägezahnrekonstruktion, $\Phi=1^\circ$, $T=300K$) eine Zerstäubungsrate von $2,5 \cdot 10^{-3}$ Nickelatome pro Proton bei Einschub parallel zur $[1\bar{1}0]$ -Richtung $\Theta=0^\circ$ und $5 \cdot 10^{-2}$ Nickelatome pro Proton bei Randeinschub. Die berechnete Zerstäubungsrate stimmt in der Größenordnung gut mit dem Wert von $4,5 \cdot 10^{-2}$ Nickelatome pro Proton überein, der an einer polykristallinen Nickeloberfläche bei einem Einschubwinkel von $\Phi=10^\circ$ gemessen wurde [113].

Ähnlich wie die Zerstäubungsrate für die Substratatome kann man auch die strahlinduzierte Desorption des adsorbierten Sauerstoffs (0,5 Monolagen) abschätzen. Unter denselben Einschußbedingungen wie oben (die Sauerstoffatome sitzen in den [001]-Ketten) werden an der Oberfläche $3,5 \cdot 10^{-2}$ Sauerstoffatome pro einfallendes Proton für $\theta=0^\circ$ und $2 \cdot 10^{-2}$ Sauerstoffatome pro Proton für Randomeinschuß abgetragen. Wenn man von einer typischen Strahlstromdichte von 100 nA/mm^2 und einer Meßzeit von 15min für ein vollständiges Ausbeuteprofil über alle θ -Werte ausgeht, treffen ca. 10^{15} Protonen unter $\phi=1^\circ$ auf 1 cm^2 Kristalloberfläche. Zusammen mit den niedrigen Zerstäubungs- und Desorptionsraten sorgt dies dafür, daß die Strahlenschäden am Nickelsubstrat und die Desorption des Sauerstoffs ziemlich klein bleiben: $2,5 \cdot 10^{12}$ bis $5 \cdot 10^{13}$ zerstäubte Ni-Atome/ cm^2 und $2 \cdot 10^{13}$ bis $3,5 \cdot 10^{13}$ desorbierte O-Atome/ cm^2 bei einer atomaren Flächendichte der Ni(110)-Oberfläche von $1,13 \cdot 10^{15}$ Ni-Atome/ cm^2 . Selbst nach 1-stündigem Protonenbeschuß konnte in den Experimenten weder eine Abnahme des Auger-Elektronensignals noch ein Anstieg des Ausbeuteminimums - beides Zeichen für Strahlenschäden - festgestellt werden.

Eine noch geringere Zerstäubungs- und Desorptionsrate ließe sich erreichen, wenn man empfindlichere Methoden zur Detektion der Auger-Elektronen anwenden würde, z.B. Einzelelektronenzählung statt Lock-in-Technik.

6.8. Fehler der Simulationsergebnisse

Die Abweichungen der berechneten Auger-Elektronenausbeuten von den wahren Werten lassen sich auf drei Gruppen von Fehlern zurückführen:

- (1) Fehler des physikalischen Modells, das der Simulation zugrunde liegt. Ungenauigkeiten der Näherungen physikalischer Gesetze.
- (2) Statistischer Fehler durch die geringe Anzahl von Projektilen und die zu grobe Rasterung der Einschußkoordinaten und Einschußwinkel.
- (3) Rundungsfehler des Computers.

Die Rundungsfehler des Rechners (3) haben keine Bedeutung, weil im Programm ohnehin die thermischen Auslenkungen der Targetatome für eine statistische Zufallskomponente sorgen. Im Vergleich zu den zufälligen thermischen Auslenkungen ist der Einfluß des Rundungsfehlers klein. Eine Akkumulierung von Rundungsfehlern ist deshalb ausgeschlossen.

Die Unzulänglichkeiten des Modells (1) ließen sich nur durch exakte Rechnungen anstelle der verwendeten Näherungen beheben, was aber mit einem erheblichen Mehraufwand an Rechenzeit verbunden wäre.

Auch die statistischen Fehler (2) ließen sich durch eine größere Anzahl von Projektilen verringern. Den typisch $N \times M = 20 \times 20$ Projektilen in der Computersimulation stehen im Experiment pro Meßpunkt 10^{14} Protonen gegenüber. Die $M \times N$ Projektile zu einem $\Theta^{(0)}$ -Wert werden mit äquidistant gerasterten Einschußkoordinaten gestartet. Die Auger-Elektronenausbeuten $Y_{IZ, IZ}(\Theta)$ zu den einzelnen Trajektorien $IZ=1, \dots, M$ $IZ=1, \dots, N$ schwanken stark, doch läßt die Ausgleichskurve eine gewisse Systematik erkennen. Wegen der Translationssymmetrie der Oberflächeneinheitszelle sind periodische Randbedingungen gegeben. Für die Ausgleichskurve wird eine 2-dimensionale Fourierreihendarstellung in x- und z-Richtung gewählt, wobei nur die niedrigsten Glieder der Fourierentwicklung herangezogen werden. Abb. 6.29 zeigt eine solche Ausgleichskurve, die an die Einzelausbeuten $Y_{IZ, JZ}$ von $M \times N = 160 \times 160$ Projektiltrajektorien angepaßt wurden. Man erkennt den Zusammenhang zwischen der Verteilung der Auger-Elektronenausbeute und der Kristallstruktur. Die gesamte Auger-Elektronenausbeute Y für einen bestimmten Einschußwinkel ergibt sich

aus der Summe der Teilbeiträge $Y_{IZ,JZ}$ aller Trajektorien:

$$Y = \sum_{IZ=1}^M \sum_{JZ=1}^N Y_{IZ,JZ} \quad (6.19)$$

Aus der Abweichung der Ausbeute $Y_{IZ,JZ}$ einer einzelnen Trajektorie vom Wert der Ausgleichskurve $\bar{Y}_{IZ,JZ}$ folgt der Fehler der Gesamtausbeute:

$$\Delta Y = \left(\sum_{IZ=1}^M \sum_{JZ=1}^N \left(Y_{IZ,JZ} - \bar{Y}_{IZ,JZ} \right)^2 \right)^{1/2} \quad (6.20)$$

und ein relativer Fehler der Gesamtausbeute:

$$\frac{\Delta Y}{Y} = \frac{\left(\sum_{IZ=1}^M \sum_{JZ=1}^N \left(Y_{IZ,JZ} - \bar{Y}_{IZ,JZ} \right)^2 \right)^{1/2}}{\sum_{IZ=1}^M \sum_{JZ=1}^N Y_{IZ,JZ}} \quad (6.21)$$

Dieser relative Fehler der Simulationsergebnisse ist für streifenden Einschub ($\Phi=1^\circ$) auf die Ni(110)-Oberfläche längs der [001]-Richtung ($\Theta=0^\circ$) und längs einer Randomrichtung ($\Theta=6^\circ$) für verschiedene Projektilzahlen $M \times N$ ermittelt worden:

Relativer Fehler $\Delta Y/Y$ der Ausbeute der L_3VV -Auger-Elektronen:

	MxN					
	5x5	10x10	20x20	40x40	80x80	160x160
$\Theta=0^\circ$	580%	90,0%	47,7%	30,2%	14,2%	6,8%
$\Theta=6^\circ$	23%	12,6%	6,6%	3,3%	1,7%	0,9%

Relativer Fehler $\Delta Y/Y$ der Ausbeute der $M_{23}VV$ -Auger-Elektronen:

	MxN					
	5x5	10x10	20x20	40x40	80x80	160x160
$\Theta=0^\circ$	16,6%	10,0%	4,6%	2,2%	1,1%	0,6%
$\Theta=6^\circ$	13,9%	7,8%	4,1%	2,3%	1,2%	0,6%

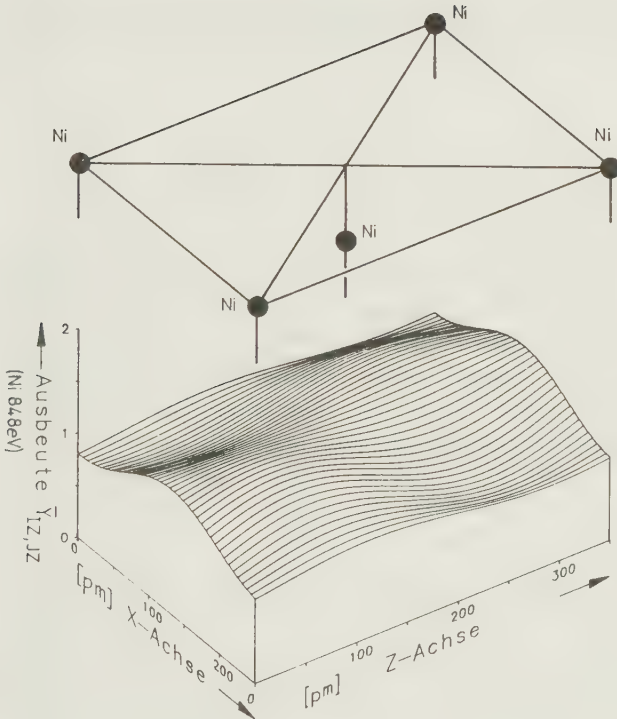


Abb. 6.29: Ausbeute an Nickel- L_3VV -Auger-Elektronen (848 eV) pro Trajektorie als Funktion der Trajektorienstartkoordinaten x und z . Die dargestellte Ausgleichskurve $\bar{Y}_{IZ,JZ}$ (3x3 komplexe Exponentialfunktionen) wurde an die Einzelausbeuten von 160x160 Projektiltrajektorien angepaßt. $\phi=1^\circ$, $\theta=0^\circ$, saubere stufenfreie Ni(110)-Oberfläche.

7. Strukturbestimmung der sauberen Oberfläche Ni(110) – (1x1)
sowie der sauerstoffbedeckten Oberfläche O/Ni(110) – (2x1)

7.1. Bisherige Untersuchungen am Adsorbatsystem
Sauerstoff auf Ni(110)

Die Struktur sauberer und sauerstoffbedeckter Ni(110)-Oberflächen ist seit Anfang der sechziger Jahre Gegenstand vieler Untersuchungen gewesen. Lange Zeit war die Beugung langsamer Elektronen (LEED) die beherrschende Technik zum Studium der Kristalloberflächen, so daß auch die Einteilung der Adsorbatstrukturen mit dieser Methode vorgenommen wurde.

7.1.1. Klassifizierung der Ni(110)-Strukturen bei
verschiedenen Sauerstoffbedeckungen

Die saubere Ni(110)-Oberfläche hat die gleiche Struktur wie eine (110)-Schnittfläche durch das Kristallinnere, ist also unrekonstruiert und zeigt somit ein (1x1)-LEED-Muster (vgl. Abb. 7.1a) [116].

Bei der Sauerstoffbedeckung auf Ni(110) unterscheidet man drei Phasen [96, 114, 115]:

- Schnelle dissoziative Chemisorption, die zu einer Bedeckung von 0,25 bis 0,5 Monolagen Sauerstoff führt.
- Umbau der chemisorbierten Schicht und Einlagerung von Sauerstoff in die obersten 2-3 Atomlagen des Nickelsubstrats.
- Bildung von Oxid NiO, ausgehend von Inseln. Langsames Dickenwachstum und Adsorption einer Sauerstoffschicht.

Bedeckt man die saubere Ni(110)-Oberfläche mit Sauerstoff, so entsteht mit steigender Bedeckung eine Reihe von LEED-Mustern, im allgemeinen zuerst das (3x1)-Muster, dann (2x1), nochmals (3x1) und schließlich (9x4) [116, 117]. Das meiste Interesse

hat sich dabei auf die (2x1)-Struktur konzentriert.

7.1.2. O/Ni(110)-(2x1)-Oberfläche

Germer und MacRae [116, 117] schlugen 1962 ein Rekonstruktionsmodell für die O/Ni(110)-(2x1)-Struktur vor, in dem jede zweite [001]-Nickelkette fehlte, das sog. Missing-Row-Modell. Die Sauerstoffposition konnten die Autoren nicht direkt bestimmen, sie nahmen aber an, daß die Sauerstoffatome die Position der fehlenden Nickelatome besetzen. Dieses Modell wurde von Heiland und Taglauer [118] aufgegriffen, um ihre Streuexperimente mit niederenergetischen Edelgasionen (Low Energy Ion Scattering - LEIS) zu interpretieren. Später [119] räumten die Autoren jedoch ein, daß sie ihre Ergebnisse auch erklären könnten, wenn sie eine unrekonstruierte Oberfläche, ähnlich dem Modell von Demuth, zugrunde legen, in der das Sauerstoffatom in einer kurzen Brücke sitzt, 40-80pm oberhalb der Nickelketten. Demuth et al. hatten nämlich 1975, gestützt auf LEED-Intensitätsmessungen und dynamische LEED-Rechnungen, ein unrekonstruiertes Modell (simple addition Modell) eingeführt, in dem die (2x1)-Struktur durch die geordnete Sauerstoffschicht selbst erzeugt wird [120, 121]. In diesem Modell ist das Substrat, die Ni(110)-Oberfläche, unrekonstruiert, und die Sauerstoffatome befinden sich 145pm oberhalb der $[1\bar{1}0]$ -Nickelketten in der Position der kurzen Brücke. Van den Berg, Verheij und Armour [96, 122] schlugen 1979 aufgrund ihrer LEIS-Messungen wiederum das Missing-Row-Modell vor. Als Sauerstoffposition fanden sie jedoch einen Platz in oder nahe den [001]-Nickelketten der rekonstruierten Oberfläche in einer langen Brücke (vgl. Abb. 7.1c). Rutherford-Rückstreuung (Rutherford Backscattering - RBS) von 100keV-Protonen in Verbindung mit Ionengitterführung und Blocking wurde von Van der Veen et al. [123] in sog. Double-Alignment-Experimenten eingesetzt, um die Ni(110)-Oberfläche bei Sauerstoffadsorption

zu untersuchen. Die Autoren bestimmten zunächst die Relaxation der Oberfläche, d.h. die Änderung des Abstandes zwischen der 1. und 2. Atomlage gegenüber dem entsprechenden Ebenenabstand im Kristallinneren. Dabei fanden sie an der sauberen Oberfläche eine Kontraktion um 4% und an der sauerstoffbedeckten Oberfläche eine Expansion um 1%. Darüberhinaus leiteten die Autoren aus ihren Meßergebnissen eine Bestätigung von Demuth's Modell der unrekonstruierten Oberfläche her, fanden aber in weiteren Untersuchungen schließlich das Missing-Row-Modell bestätigt [124]. Bei geeigneter Anordnung der Adsorbatatome ist mit derselben Methode auch die Lokalisierung der Adsorbate möglich [125], doch bei der Ni(110)-Oberfläche geben die Autoren die Position des adsorbierten Sauerstoffs nicht an. Jüngere LEIS-Untersuchungen von Englert, Heiland und Taglauer [126], in denen durch Vergleich der Ergebnisse von He^+ und Li^+ -Streuexperimenten das Problem der Neutralisation umgangen wird, favorisieren ebenfalls das Missing-Row-Modell. Eine andere Untersuchung wurde von Masuda et al. [127] mit hochaufgelöster Elektronenenergieverlustspektroskopie (Electron Energy Loss Spectroscopy - EELS) durchgeführt. Diese Autoren sind der Meinung, daß zwei verschiedene Strukturen nebeneinander vorliegen, wenn das (2x1)-LEED-Muster zu beobachten ist: Einerseits die unrekonstruierte Oberfläche nach Demuth, andererseits die rekonstruierte Oberfläche nach Van den Berg. Ebenfalls mit EELS gelangen Barò und Ollè [128] zu dem Ergebnis, daß sich in der O/Ni(110)-(2x1)-Struktur der Sauerstoff in einer langen Brücke befindet, wie von Van den Berg vorgeschlagen. Engel und Rieder benutzten die Atomstrahlbeugung zur Oberflächen-Strukturanalyse und fanden, daß die adsorbierten Sauerstoffatome in [001]-Richtung abgeschattet werden [129]. Ihre Ergebnisse stimmen mit dem Missing-Row-Modell von Van den Berg überein. Auch die recht junge Methode der Raster-Tunnelelektronen-Mikroskopie (Scanning Tunneling Microscopy - STM) wurde 1984 von Barò et al. auf die O/Ni(110)-(2x1)-Oberfläche angewandt [130]. Bei dieser Technik mißt man den Tunnelstrom zwischen der Probenoberfläche und einer Sondenspitze, die im Abstand weniger Nanometer über die Ober-

fläche bewegt wird, und erhält daraus ein direktes Bild des Oberflächenreliefs im Ortsraum. Allerdings wird mehr die Elektronendichteverteilung an der Oberfläche als die Atom-anordnung abgebildet. Die Autoren finden eine Sägezahnrekonstruktion des Nickelsubstrats und eine Sauerstoffposition in der langen Brücke.

Diese zuletzt genannte Untersuchung bestätigt das Sägezahn-Rekonstruktionsmodell und die Sauerstoffposition (vgl. Abb. 7.1b), die im Jahr 1983 von Schuster und Varelas publiziert wurden [100, 131]. Im folgenden wird gezeigt, wie mit der hier diskutierten neuen Methode, einer Synthese aus Oberflächen-Ionengitterführung und ioneninduzierter Auger-Elektronenspektroskopie, die Struktur der sauberen und der sauerstoffbedeckten O/Ni(110)-(2x1)-Oberfläche analysiert wurde und simultan die Sauerstoffposition bestimmt wurde.

7.2. Strukturbestimmung des Nickelsubstrats an der sauberen und der sauerstoffbedeckten (110)-Oberfläche

Zur Untersuchung der Oberflächenstruktur des Nickelsubstrats wird die Ausbeute Y an Nickel- L_3VV -Auger-Elektronen (in Abb. 6.1 durch zwei Pfeile markiert) in Abhängigkeit vom lateralen Einschubwinkel θ betrachtet. Die Halbwertsbreite des Ausbeute-profils wird als Maß für den Abstand der Atome in den Führungsketten benutzt.

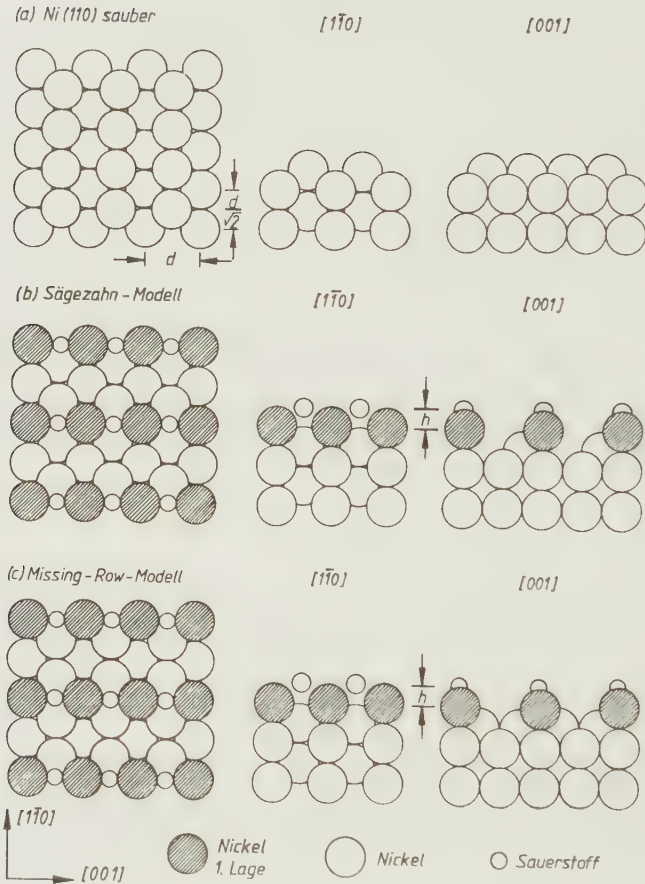


Abb. 7.1: Strukturmodelle der Ni(110)-Oberfläche:
 (a) saubere (1x1)-Oberfläche;
 (b) rekonstruierte Sägezahnoberfläche O/Ni(110)-(2x1) und
 (c) rekonstruierte Missing-Row-Oberfläche O/Ni(110)-(2x1).
 Links: Draufsicht;
 Mitte: Schnitt transversal zur $[1\bar{1}0]$ -Richtung;
 Rechts: Schnitt transversal zur $[001]$ -Richtung; $d=0,352\text{nm}$.

7.2.1. $[\bar{1}\bar{1}0]$ -Einschußrichtung

Für eine saubere Ni(110)-Oberfläche und Einschluß von 150keV-Protonen längs der $[\bar{1}\bar{1}0]$ -Richtung ist in Abb. 7.2 das Ausbeuteprofil angetragen. Die Meßpunkte sind auf den Randomwert normiert und durch Dreiecke dargestellt. Das Ausbeuteprofil weist eine halbe Halbwertsbreite $\theta_{1/2}$ von $2,6^\circ \pm 0,2^\circ$ auf. Dieser Wert ist in guter Übereinstimmung mit dem theoretischen Wert von $2,5^\circ$, wie er sich aus Gl. (4.1) und (4.2) ergibt, wenn man einen Atomabstand $d_{a[\bar{1}\bar{1}0]}$ zugrunde legt, der dem Abstand der Atome im Kristallinneren entspricht. Dies ist ein eindeutiger Hinweis auf eine unrekonstruierte Oberfläche; zumindest in den $[\bar{1}\bar{1}0]$ -Ketten

Abb. 7.2: Ausbeuteprofil von Nickel- L_3VV -Auger-Elektronen (848eV) induziert durch 150keV-Protonen bei axialer Oberflächengitterführung entlang der $[\bar{1}\bar{1}0]$ -Richtung. Es wird eine saubere Ni(110)-Oberfläche unter $\phi=1^\circ$ beschossen. Die durchgezogene Linie ist das Ergebnis einer Computersimulation, bei der ein Stufenabstand $s=100$ und eine Stufenhöhe von $0,25\text{nm}$ zugrunde gelegt ist.

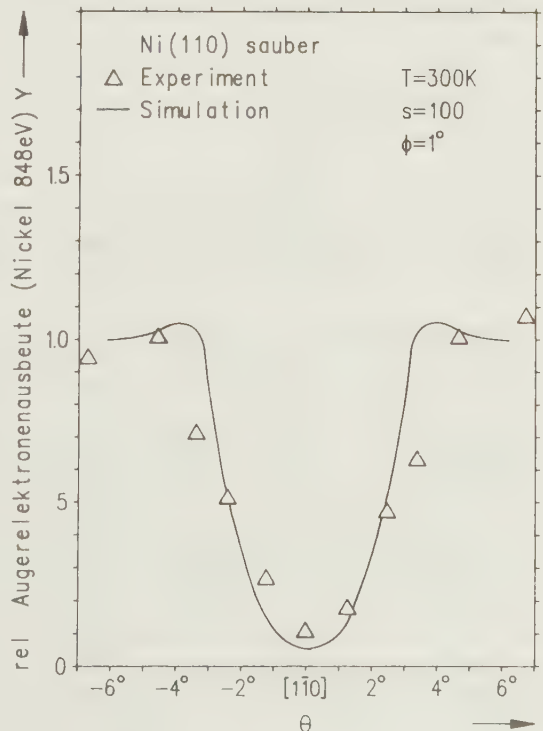
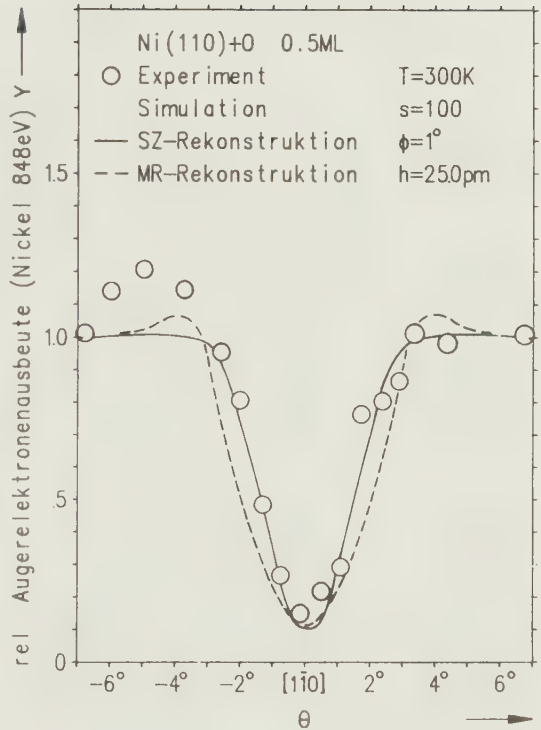


Abb. 7.3: Ausbeuteprofil von Nickel-L₃VV-Auger-Elektronen (848eV) induziert durch 150keV-Protonen bei axialer Oberflächengitterführung entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung. Es wird eine mit ca. 0,5ML Sauerstoff bedeckte Ni(110)-Oberfläche unter $\phi=1^\circ$ beschossen. Die durchgezogene und die gestrichelte Linie sind die Ergebnisse von Computersimulationen der rekonstruierten Oberfläche O/Ni(110)-(2x1) für zwei Rekonstruktionsmodelle: das Sägezahnmodell (SZ) und das Missing-Row-Modell (MR).



Für eine zweite Messung wird die Oberfläche mit 0,4 bis 0,5 Monolagen Sauerstoff bedeckt und das Experiment unter sonst identischen Bedingungen wiederholt (Z_1 , Z_2 , E_1 und ϕ bleiben konstant). In Abb. 7.3 markieren offene Kreise die Meßpunkte. Durch die Sauerstoffbedeckung nimmt die Breite des Ausbeuteminimums auf $\theta_{1/2}=1,7^\circ$ ab. Der entsprechende Winkel $\psi_{1/2}$ der sauberen Ni(110)-Oberfläche verhält sich zu $\psi_{1/2}$ der sauerstoffbedeckten Nickeloberfläche wie $\sqrt{2}$ zu 1 (vgl. Tabelle 7.1):

$$\psi_{1/2}(\text{Ni}) / \psi_{1/2}(\text{Ni+O}) = \sqrt{2}$$

und nach Gl. (4.1) folgt daraus:

$$d_{a[1\bar{1}0]}(\text{Ni+O}) / d_{a[1\bar{1}0]}(\text{Ni}) = 2.$$

Es muß also aufgrund der Sauerstoffbedeckung der Atomabstand in den $[1\bar{1}0]$ -Führungsketten der Oberfläche doppelt so groß geworden sein wie in den $[1\bar{1}0]$ -Ketten im Inneren des Kristalls. Aus dieser einfachen Überlegung folgt bereits, daß die Oberfläche, zumindest bezüglich der $[1\bar{1}0]$ -Richtung, durch die Sauerstoffbedeckung rekonstruiert wird.

Die Computersimulation wird für die rekonstruierte Oberfläche wiederholt. Der experimentelle Befund legt zwei Rekonstruktionsmodelle nahe: Das Missing-Row-Modell und das Sägezahnmodell. Das Missing-Row-Modell (Abb. 7.1c), in dieser Form erstmals von Van den Berg et al. [96, 122] vorgeschlagen, zeigt in den Simulationsergebnissen bereits die richtige Tendenz. Die dazugehörige gestrichelte Kurve in Abb. 7.3 ist deutlich schmaler als bei der unrekonstruierten Oberfläche, doch die Übereinstimmung von Experiment und Simulation ist noch zu verbessern. Im Missing-Row-Modell besitzen die Atome in der obersten $[1\bar{1}0]$ -Kette doppelten Abstand. Die unmittelbar darunter liegenden Ketten sind dagegen ebenso dicht gepackt wie im Kristallinneren. Diese Ketten haben noch so viel Einfluß auf die Gitterführung, daß das Ausbeuteprofil in der Simulation um weniger als den Faktor $\sqrt{2}$ gegenüber der unrekonstruierten Oberfläche schmaler wird. Deshalb wurde noch ein weiteres Rekonstruktionsmodell, das Sägezahnmodell (vgl. Abb. 7.1b), getestet, in dem die erste und die zweite Atomlage aus $[1\bar{1}0]$ -Ketten mit doppeltem Atomabstand bestehen. Die ausgezogene Linie in Abb. 7.3 zeigt das Simulationsergebnis für dieses Modell. Mit dieser Rekonstruktion, bei der sich jede zweite $[001]$ -Kette in die Position der nächsthöheren $[001]$ -Kette verlagert, indem sie ein asymmetrisches Sägezahnprofil bildet, ergibt sich eine gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation. Solch eine Sägezahn-Oberfläche ist schon von Bonzel und Ferrer für die (1×2) -Oberfläche von sauberem Pt(110) vorge-

schlagen worden [132]. Bei der Pt(110)-(1x2)-Oberfläche ist jedoch die Ausrichtung der Sägezähne um 90° gegenüber der O/Ni(110)-(2x1)-Oberfläche gedreht.

Ein großer Vorteil des Sägezahn-Rekonstruktionsmodells liegt darin, daß seine Bildung leicht zu erklären ist. Induziert durch die Sauerstoffadsorption braucht sich jedes Nickelatom nur 0,25nm weit bewegen, um den Übergang der unrekonstruierten Oberfläche in die rekonstruierte zu bewerkstelligen. Beim Missing-Row-Modell hingegen müssen die sog. fehlenden Ketten über weite Entfernungen an der Oberfläche wandern, bis sie in einem anderen Gebiet der Oberfläche als zusätzliche Ketten (added rows) angelagert werden. An der Grenze zwischen dem Gebiet der fehlenden Ketten und dem Gebiet zusätzlicher Ketten müßte sich eine Stufe bilden oder eine vorhandene Stufe würde verlagert.

Abgesehen von der Struktur der Oberfläche sind in der Simulation alle anderen Parameter, wie Temperatur und Stufenabstand, bei der sauberen und der sauerstoffbedeckten Oberfläche gleich. Es hat sich in den Simulationen herausgestellt, daß der Abstand h der Sauerstoffatome von der obersten Nickellage nur einen vernachlässigbaren Einfluß auf die Form der berechneten Ausbeuteprofile der Nickel- L_{3VV} -Auger-Elektronen hat.

Wenn man die Struktur von Oberflächen klären möchte, indem man die gemessenen Daten mit gerechneten Daten zu bestimmten Modellen vergleicht, stellen sich immer zwei Fragen: Erstens, ob wirklich alle möglichen Modelle getestet wurden; zweitens, ob die verschiedenen Modelle eindeutig unterscheidbar sind. Die erste Frage muß man im allgemeinen wohl verneinen, da man die zu betrachtende Einheitszelle immer weiter vergrößern kann, z.B. durch Hinzunahme tieferer Lagen. Die angewandte Meßmethode liefert jedoch nur eine beschränkte Information. Pro Ausbeuteprofil erhält man zwei Kenngrößen, nämlich die Halbwertsbreite des Profils und die Tiefe des Ausbeuteminimums. Es ist deshalb nicht möglich, aus den vorliegenden Meßergebnissen mehr als vier Koordinaten der Nickelsubstratatome zu bestimmen. Für die restlichen Koordinaten muß man realistische physikalische An-

nahmen machen. Man kann auch keine größere Genauigkeit erwarten, als die Halbwertsbreite Γ^* der thermisch verbreiterten Ionisationswahrscheinlichkeit $I^*(b)$ vorgibt. Legt man für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Atome $A(\vec{r}_0)$ aufgrund ihrer thermischen Schwingungen eine Gaußkurve mit der Halbwertsbreite Γ_{TH} zugrunde und für die Ionisationswahrscheinlichkeit $I(b)$ eine Gaußkurve der Halbwertsbreite Γ_I , so folgt für die thermisch verbreiterte Ionisationswahrscheinlichkeit $\Gamma^* = \sqrt{\Gamma_{TH}^2 + \Gamma_I^2}$. Für Nickel-L₃VV-Auger-Elektronen aus der obersten Atomlage ergibt sich bei einer Temperatur T von 300K eine Halbwertsbreite von $\Gamma^* = 14\text{pm}$ für jede Koordinate. Andererseits kann man mit Oberflächen-Ionengitterführung jedoch zwischen all jenen Oberflächenstrukturen unterscheiden, die die Ionenflußdichteverteilung unterschiedlich beeinflussen. Es wäre, zum Beispiel, auch möglich, durch eine Zickzack-Anordnung der obersten Nickelatome die Halbwertsbreite des Ausbeuteprofiles $\Psi_{1/2}$ um den Faktor $\sqrt{2}$ zu vermindern. Doch gleichzeitig würden die Zickzack-Ketten das Ausbeuteminimum um einen Faktor 2 bis 4 erhöhen (abhängig von den thermischen Schwingungen der Oberflächennickelatome). Dies wird im Experiment aber nicht beobachtet (vgl. Abb. 7.2 und 7.3).

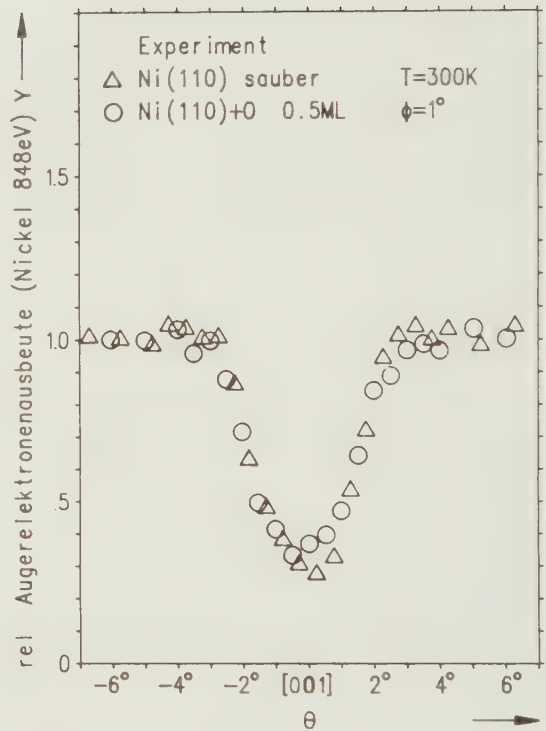
Die LEIS-Studie [96] unterscheidet nicht zwischen dem Missing-Row-Modell und dem Sägezahnmodell, da bei dieser Untersuchung nur Einfach- und Zweifachstreuprozesse an der ersten Atomlage betrachtet worden sind. Die Streuung an der zweiten Atomlage - nur hierin unterscheiden sich die beiden Rekonstruktionsmodelle - führt zu einer komplizierten Stoßfolge (Mehrfachstreuung). Nach Auskunft von Armour, einem der Autoren von Ref. [96, 122], sind die LEIS-Experimente nicht mit dem Sägezahnmodell verglichen worden. Mit Atomstrahlbeugung haben Engel, Rieder und Batra [129, 133] eine stark gewellte Oberfläche in $[\bar{1}\bar{1}0]$ -Richtung und eine schwach gewellte in $[001]$ -Richtung gefunden. Dies könnte sowohl mit dem Missing-Row-Modell als auch mit dem Sägezahnmodell erklärt werden. Eine eindeutige Unterscheidung ist nach Meinung der Autoren aufgrund ihrer Meßergebnisse nicht möglich [133].

Abb. 7.1b zeigt das Sägezahn-Rekonstruktionsmodell für die Nickel-(110)-Oberfläche mit einer Bedeckung von 0,5 Monolagen Sauerstoff. Es ist bekannt, daß bereits bei einem niedrigeren Bedeckungsgrad, etwa 0,4 Monolagen, neue Rekonstruktionen einsetzen, doch um möglichst idealisierte Zustände vergleichen zu können, gehen die Simulationen vom theoretischen Endzustand der O/Ni(110)-(2x1)-Sägezahnrekonstruktion aus.

7.2.2. [001]-Einschußrichtung

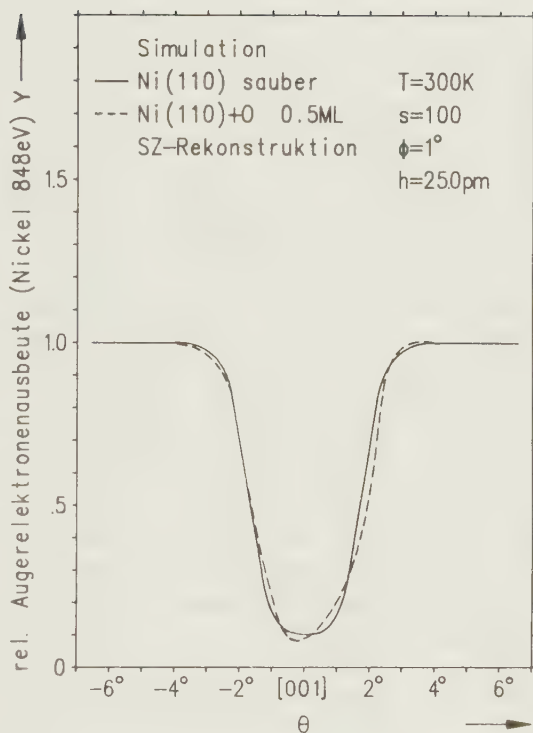
In den Oberflächenmodellen der Abb. 7.1 unterscheiden sich die [001]-Nickelketten der rekonstruierten Oberfläche nicht von denen der unrekonstruierten Oberfläche. In dieser Richtung ist der Abstand der Nickelatome für die saubere und für die rekonstruierte Oberfläche gleich (vgl. Abb. 7.1a und b). Um das Sägezahnmodell zu prüfen, werden die Ausbeuteprofile in [001]-Richtung gemessen. Aufgrund der Oberflächenmodelle erwartet man, daß die Ausbeutekurven für die saubere und die sauerstoffbedeckte Oberfläche identisch sind. Abb. 7.4 zeigt die Deckungsgleichheit der beiden experimentell bestimmten Ausbeuteprofile und bestätigt damit die obige Überlegung. Auch die Ergebnisse der Computersimulation in Abb. 7.5 unterstützen dies. Die Simulationen liefern für die rekonstruierte Oberfläche eine leicht asymmetrische Ausbeutekurve, die auf das Sägezahnprofil der Oberflächenstruktur zurückzuführen ist. Im Experiment ist eine signifikante Asymmetrie nicht zu beobachten. Dies ist jedoch kein Widerspruch. Der Ionenstrahl hat nämlich einen Durchmesser von 2mm, und deshalb stammt die gemessene Ausbeute aus Regionen mit Sägezähnen nach rechts wie auch aus Regionen mit Sägezähnen nach links. Für das in Abb. 7.5 dargestellte Ausbeuteprofil ist nur eine Sägezahnorientierung, nämlich die nach rechts, benutzt worden.

Abb. 7.4: Gemessene Ausbeuteprofile von Nickel- L_3VV -Auger-Elektronen (848eV) induziert durch 150keV-Protonen bei axialer Oberflächen-gitterführung entlang der [001]-Richtung. Es wird eine (Δ) saubere Ni(110)-Oberfläche und ($\circ$) eine mit ca. 0,5ML Sauerstoff bedeckte Oberfläche O/Ni(110)-(2x1) unter $\phi=1^\circ$ beschossen.



Als Ergebnis der Ausbeutemessungen der Nickel- L_3VV -Auger-Elektronen für Ioneneinschuß in $[1\bar{1}0]$ - und [001]-Richtung kann man festhalten: Die saubere Ni(110)-Oberfläche ist unrekonstruiert. Unter dem Einfluß einer Sauerstoffbedeckung von 0,4 bis 0,5 Monolagen, wenn das (2x1)-LEED-Muster beobachtet wird, rekonstruiert die Ni(110)-Oberfläche. Die eindeutig beste Übereinstimmung zwischen Experiment und Computersimulation ergibt sich für das Sägezahnmodell (Abb. 7.1b).

Abb. 7.5: Berechnete Ausbeuteprofile von Nickel- L_3VV -Auger-Elektronen (848eV) induziert durch 150keV-Protonen bei axialer Oberflächen-gitterführung entlang der [001]-Richtung. Die Simulationsergebnisse wurden für eine saubere Ni(110)-Oberfläche und eine sauerstoffbedeckte, nach dem Sägezahnmodell (SZ) rekonstruierte Oberfläche O/Ni(110)-(2x1) ermittelt. Die Asymmetrie des Ausbeuteprofils im Falle der rekonstruierten Oberfläche rührt von der asymmetrischen sägezahn-förmigen Atomanordnung her (vgl. Abb. 7.1b).



In jüngerer Zeit durchgeführte Untersuchungen mit der Rastertunnelelektronenmikroskopie [130] bestätigen das Sägezahnmodell. Ganz offensichtlich widerlegt ist die Aussage von Demuth [121], wonach nicht die Rekonstruktion des Nickelsubstrats, sondern die Anordnung des adsorbierten Sauerstoffs die Ursache für das (2x1)-LEED-Muster ist. Relaxationen der oberflächennahen Atomlagen wurden nicht untersucht.

7.3. Positionsbestimmung der adsorbierten Sauerstoffatome

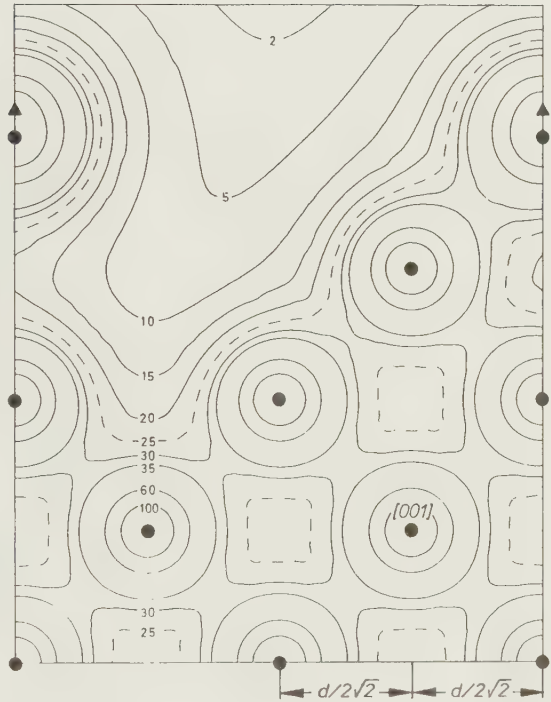
Die inhomogene Flußdichteverteilung geführter Projektile (vgl. Abb. 4.3 und 7.7) bietet sich an, die adsorbierten Atome auf der Kristalloberfläche zu lokalisieren. Die Auger-Elektronenemission bei Einschub parallel zur Atomkette ist verstärkt, wenn die Adsorbate im Kanal zwischen den Atomketten sitzen; sie reduziert sich, wenn die Adsorbate sich in oder nahe den Ketten befinden, weil in diesem Fall die Adsorbate durch das abstoßende Potential der Gitteratome abgeschattet werden (vgl. Abb. 7.6). Der Vergleich der Auger-Elektronenausbeuten bei Ioneneinfall längs der verschiedenen niederindizierten Richtungen erlaubt eine einfache und direkte Aussage über die Position des Adsorbats bezüglich des Substrats. Axiale Oberflächen-Ionengitterführung ist bereits in Kombination mit anderen stoßparameterabhängigen Prozessen (Kernreaktion [134, 135], Rückstreuung [136], Lichtanregung [137]) benutzt worden, um Adsorbate zu lokalisieren. Man könnte die genannten Verfahren als Triangulation in den zwei Dimensionen der Oberfläche bezeichnen.

7.3.1. [001]-Einschubrichtung

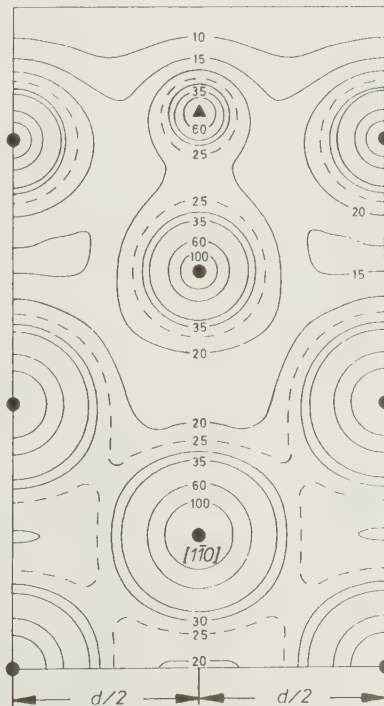
Simultan mit der Auger-Linie von Nickel wird auch die Auger-Linie von Sauerstoff $KL_{23}L_{23}$ bei 510eV gemessen. Da die Sauerstofflinie gerade in einem Bereich des Elektronenspektrums liegt, in dem sich der Untergrund stark ändert (vgl. Energieverteilung der Sekundärelektronen bei Einschub von 150keV-Protonen auf Nickel Abb. 4.6), kann man die Auger-Linie von Sauerstoff erst im zweimal differenzierten Spektrum $(d^2N_e/dE_e^2)(E_e)$ erkennen. Abb. 7.8 zeigt das Ausbeuteprofil, das man für Sauerstoff- $KL_{23}L_{23}$ -Auger-Elektronen bei Einschub von 150keV-Protonen längs der [001]-Richtung erhält. Das Ausbeuteprofil besitzt ein Minimum, das dem der Nickel- L_3VV -Auger-Elektronen

(a)

Abb. 7.6: Äquipotentiallinien der Wechselwirkung Proton-Kristallatom an der sauerstoffbedeckten, nach dem Sägezahnmodell rekonstruierten Oberfläche $O/Ni(110)-(2 \times 1)$ im transversalen Schnitt (a) zur $[001]$ - und (b) zur $[1\bar{1}0]$ -Richtung. Der dargestellte Potentialverlauf beruht auf der Überlagerung von Kontinuumpotentialen der Atomketten. Für die Wechselwirkung Proton-Nickelatom bzw. Proton-Sauerstoffatom wird das Thomas-Fermi-Potential in der Molière'schen Näherung nach Gl. (5.7) benutzt. (●) Position der Nickelatomketten; (▲) Position der Sauerstoffatomketten; Gitterkonstante $d=0,352\text{nm}$. Die potentielle Energie der Protonen in dem genannten Potential ist in Einheiten von [eV] angegeben.



(b)

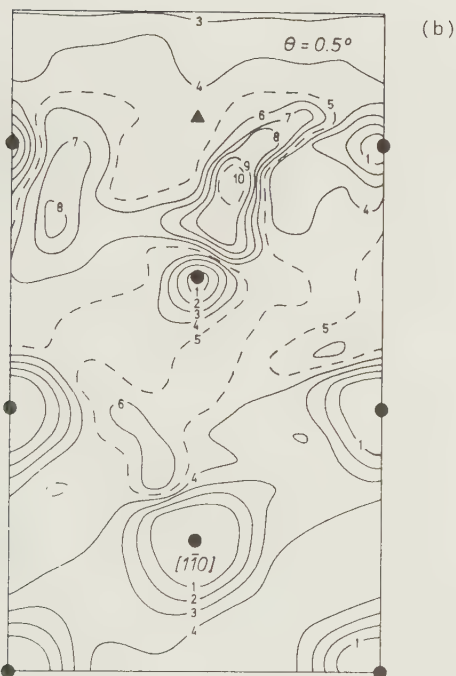


(a)

Abb. 7.7: Flußdichteverteilungen von 150keV-Protonen bei axialer Oberflächengitterführung für verschiedene laterale Einschubwinkel $\theta=0^\circ$, $0,5^\circ$, $1,0^\circ$ und $1,5^\circ$ zur $[\bar{1}\bar{1}0]$ -Richtung. Die Ergebnisse beruhen auf Computersimulationen, wobei eine sauerstoffbedeckte, nach dem Sägezahnmodell rekonstruierte Oberfläche O/Ni(110)-(2x1) zugrunde gelegt ist ($\phi=1^\circ$, $T=300K$, stufenfreie Oberfläche, 80×40 Projektilen). Die Flußdichte ist in Ebenen transversal zur $[001]$ -Richtung gemessen und auf die halbe einfallende Flußdichte normiert (Gl. 5.31). (●) Position der Nickelatomketten; (▲) Position der Sauerstoffatomketten; Gitterkonstante $d=0,352nm$.

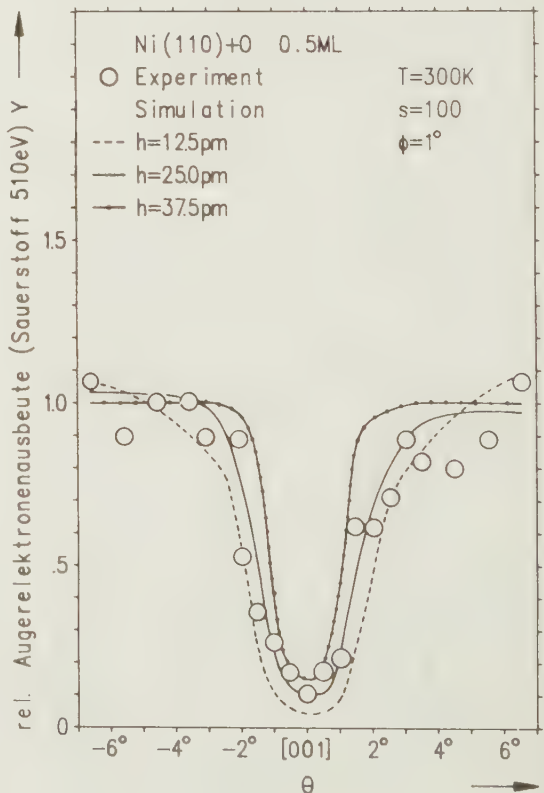


(c)



gleich, wenn man in derselben Richtung einschießt (vgl. Abb. 7.8 mit 7.4). Das Potential der Sauerstoffatome allein wäre nicht stark genug, solch ein breites und tiefes Ausbeuteminimum zu erklären (vgl. Abb. 7.6a). Also müssen es die Nickelatome sein, die das Potential der Sauerstoffatomkette verstärken. Das abstoßende Potential der [001]-Nickelatomketten schattet die Sauerstoffatome ab. Deshalb können die Sauerstoffatome nur von den Protonen angeregt werden, die den Potentialwall der [001]-Nickelketten durchbrechen. Dies beweisen die Meßergebnisse in Abb. 7.8. Daraus kann man schließen, daß die Sauerstoffatome nicht zwischen den [001]-Nickelatomketten,

Abb. 7.8: Ausbeuteprofil von Sauerstoff-KL₂₃L₂₃-Auger-Elektronen (510eV) induziert durch 150keV-Protonen bei axialer Oberflächengitterführung entlang der [001]-Richtung. Es wird eine mit ca. 0,5ML Sauerstoff bedeckte Ni(110)-Oberfläche unter $\phi=1^\circ$ beschossen. Die eingetragenen Kurven sind das Ergebnis von Computersimulationen zum Sägezahn-Rekonstruktionsmodell (SZ) für verschiedene Abstände Sauerstoffatom - Nickelatomkette.



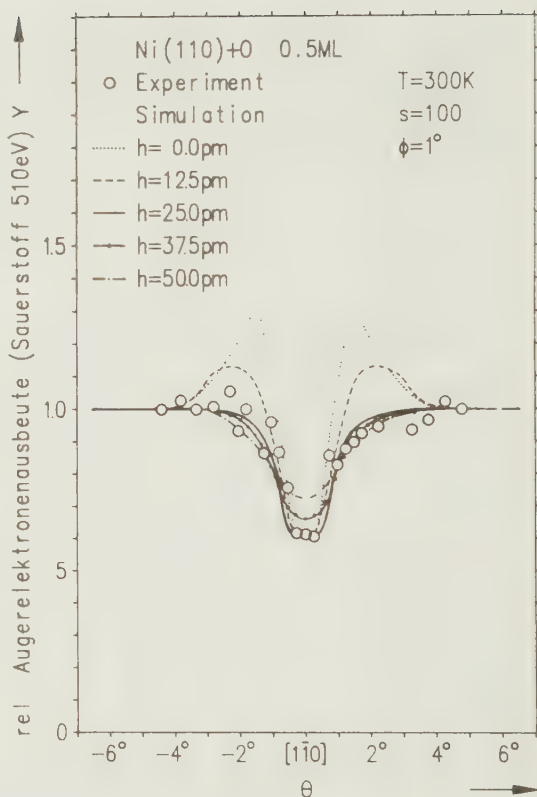
sondern in den [001]-Nickelketten oder in ihrer unmittelbaren Nähe sitzen müssen. Dieses Ergebnis schließt die Sauerstoffposition am Ort der fehlenden Nickelketten aus, wie von Germer und MacRae vermutet [116].

7.3.2. $[1\bar{1}0]$ -Einschußrichtung

Die Situation ist ganz anders, wenn der Protonenstrahl längs der $[1\bar{1}0]$ -Richtung einfällt. Wie Abb. 7.9 zeigt, erhält man in diesem Fall ein sehr schmales Minimum von $\Theta_{1/2}=0,8^\circ$ bzw. $\Psi_{1/2}=1,3^\circ$ und von geringer Tiefe. Verglichen mit dem Minimum beim Einschub längs der [001]-Richtung ist hier beim Einschub längs der $[1\bar{1}0]$ -Richtung die Ausbeute im Minimum 5-mal so groß. Das bedeutet, daß die Sauerstoffatome hier nicht durch die Nickelatome abgeschattet werden, sondern offen zwischen den $[1\bar{1}0]$ -Nickelketten sitzen. Es erhebt sich die Frage, warum überhaupt noch ein Minimum entsteht, wenngleich ein kleines, und nicht stattdessen ein Maximum der Ausbeute an Sauerstoff-Auger-Elektronen. Dies liegt daran, daß das Flußdichtemaximum unterhalb der adsorbierten Sauerstoffatome liegt und daß die Sauerstoffatome selbst als Kette die Ionen führen. Das Führungspotential der Sauerstoffketten ist zwar mit $Z_2=8$ wesentlich schwächer als das der Nickelketten mit $Z_2=28$ (vgl. Abb. 7.6b), beeinflusst aber dennoch den Ionenfluß (vgl. Abb. 7.7a). Für eine reine Sauerstoffkette mit einem Atomabstand $d_{a[1\bar{1}0]}$ von 500pm sagt die Formel (4.1) nach Lindhard [22] eine halbe Halbwertsbreite $\Psi_{1/2}$ von 1° voraus, bzw. $1,1^\circ$ nach Varelas und Sizmann [23].

Durch diese einfachen Überlegungen konnte die laterale Sauerstoffposition in der Oberfläche bestimmt werden. Kombiniert man die Ergebnisse aus beiden Einschubrichtungen, so ergibt sich die lange Brücke zwischen den Nickelatomen in den obersten [001]-Ketten der rekonstruierten Oberfläche (vgl. Abb. 7.1b).

Abb. 7.9: Ausbeuteprofil von Sauerstoff-KL₂₃L₂₃-Auger-Elektronen (510eV) induziert durch 150keV-Protonen bei axialer Oberflächengitterführung entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung. Es wird eine mit ca. 0,5ML Sauerstoff bedeckte Ni(110)-Oberfläche unter $\phi=1^\circ$ beschossen. Die einge-tragenen Kurven sind das Ergebnis von Computer-simulationen zum Säge-zahn-Rekonstruktions-modell (SZ) für ver-schiedene Abstände Sauerstoffatom - Nickel-atomkette.



7.3.3. Bestimmung des Abstandes Sauerstoffatom-Nickelatomkette

Um die Lage des Adsorbats in der 3. Dimension, also den Abstand der Sauerstoffatome zu den Nickelatomketten, zu bestimmen, vergleicht man die gemessenen Ausbeuteprofile mit gerechneten. Die Rekonstruktion nach dem Sägezahnmodell zusammen mit der experimentell bestimmten lateralen Position der Sauerstoffatome dient als Basis für Computersimulationen, in denen nur noch der Abstand h des Sauerstoffatoms zur obersten

Atomlage variiert wird. In Abb. 7.8 und 7.9 sind die berechneten Ausbeuteprofile von Sauerstoff-KL₂₃L₂₃-Auger-Elektronen bei Protoneneinfall entlang der [001]- bzw. [1 $\bar{1}$ 0]-Richtung dargestellt. In beiden Einschubrichtungen ergibt ein und derselbe Abstand $h=25\text{pm}$ die beste Übereinstimmung mit dem Experiment. Die Ergebnisse, die für die Sauerstoffabstände $h=12,5\text{pm}$ und $h=37,5\text{pm}$ aus der Simulationsrechnung resultieren, unterscheiden sich deutlich von den experimentellen Werten. Eine Toleranz Δh von $12,5\text{pm}$ bei einem Abstand von 25pm mag vielleicht den Eindruck erwecken, daß die Genauigkeit der Meßmethode nicht hoch sei. Dieser Eindruck wäre aber nicht richtig, da die Toleranz Δh von $12,5\text{pm}$ mit dem Gitterabstand von 250pm verglichen werden muß. Der Sauerstoffabstand von $25\pm 12,5\text{pm}$ entspricht einer Bindungslänge Nickel-Sauerstoff von $179\pm 3\text{pm}$. Eine Formel für polare Bindungen von Schomaker und Stevenson [138] liefert eine Bindungslänge von 183pm für die Einfachbindung Ni-O und 169pm für die Doppelbindung Ni=O. Die gefundene Bindungslänge des adsorbierten Sauerstoffatoms auf der rekonstruierten O/Ni(110)-(2x1)-Oberfläche von $179\pm 3\text{pm}$ ist in guter Übereinstimmung mit der Bindungslänge einer Einfachbindung. Zwei Einfachbindungen besitzt das Sauerstoffatom auch, wenn es in der großen Brücke Ni-O-Ni zwischen zwei Nickelatomen sitzt. Bindungslängen sind bei Metallen und Metall-Adsorbat-Systemen die einzige Größe, die in allen Strukturen ziemlich genau eingehalten wird, im Gegensatz zu Halbleitern, bei denen auch die Bindungswinkel erhalten bleiben.

7.4. Ergebnisse der Oberflächen-Strukturanalyse

Die saubere und die sauerstoffbedeckte Ni(110)-Oberfläche wurde anhand der Ausbeuteprofile der Nickel-L₃VV-Auger-Elektronen und Sauerstoff-KL₂₃L₂₃-Auger-Elektronen bei Beschuß mit 150keV -Protonen längs der [001]- und der [1 $\bar{1}$ 0]-Richtung untersucht. An der sauberen Oberfläche mißt man bei Zimmertemperatur

für beide Einschüßrichtungen Ausbeuteprofile, die sowohl mit simulierten Ausbeuteprofilen als auch mit den aus der Theorie der Kontinuumpotentiale bestimmten Halbwertsbreiten übereinstimmen, wenn man von einer Oberflächenstruktur wie im Kristallinneren ausgeht (vgl. Abb. 7.1a). Dieses Ergebnis bestätigt frühere Untersuchungen [116], wonach die saubere Ni(110)-Oberfläche nicht rekonstruiert ist. Bei einer Sauerstoffbedeckung von 0,4 bis 0,5 Monolagen zeigen die Ausbeuteprofile der Nickel-L₃VV-Auger-Elektronen eine (2x1)-Rekonstruktion der Ni(110)-Oberfläche. Als mögliche Modelle für die gefundene (2x1)-Rekonstruktion wurden für das Sägezahnmodell (Abb. 7.1b) und für das Missing-Row-Modell (Abb. 7.1c) die Ausbeuteprofile in Computersimulationen berechnet. Das Sägezahnmodell weist eine deutlich bessere Übereinstimmung mit dem Experiment auf. Nach diesem Modell ist die sauerstoffbedeckte Ni(110)-Oberfläche in (2x1)-Struktur rekonstruiert, wobei sich jede zweite [001]-Nickelatomkette in der Oberfläche seitlich nach oben in die Position der nächsthöheren verschiebt, so daß eine asymmetrische sägezahnförmige Anordnung der Nickelatome entsteht. Bei der Bildung der Sägezahnrekonstruktion aus der unrekonstruierten Oberfläche brauchen sich die Nickelatome nur um 0,25nm verlagern, während die Bildung der Missing-Row-Rekonstruktion eine langreichweitige Wanderung der Nickelatomketten erfordert. Die Ausbeuteprofile der Sauerstoff-KL₂₃L₂₃-Auger-Elektronen für Protoneneinschüß in [001]- und $[1\bar{1}0]$ -Richtung liefern unmittelbar als laterale Position der Sauerstoffatome die lange Brücke zwischen den Nickelatomen der [001]-Ketten. Aus dem Vergleich der Ausbeuteprofile der Sauerstoff-Auger-Elektronen von Experiment und Simulation ließ sich der Abstand der Sauerstoffatome von den Nickelatomketten bestimmen. Daraus folgt eine Sauerstoffposition $25 \pm 12,5$ pm oberhalb der obersten [001]-Nickelatomketten der rekonstruierten Oberfläche. Die daraus resultierende Bindungslänge von 179 ± 3 pm zwischen den Nickelatomen und dem adsorbierten Sauerstoff entspricht einer Einfachbindung.

8. Computerprogramm

In den Simulationsrechnungen wurden folgende Programmversionen benutzt:

Saubere unrekonstruierte Ni(110)-Oberfläche:

NIO01 Protoneneinschuß in [001]-Richtung;

NI110 Protoneneinschuß in $[1\bar{1}0]$ -Richtung;

O/Ni(110)-(2x1)-Oberfläche mit Sägezahnrekonstruktion:

NIOX00B Protoneneinschuß in [001]-Richtung;

NIOX11B Protoneneinschuß in $[1\bar{1}0]$ -Richtung;

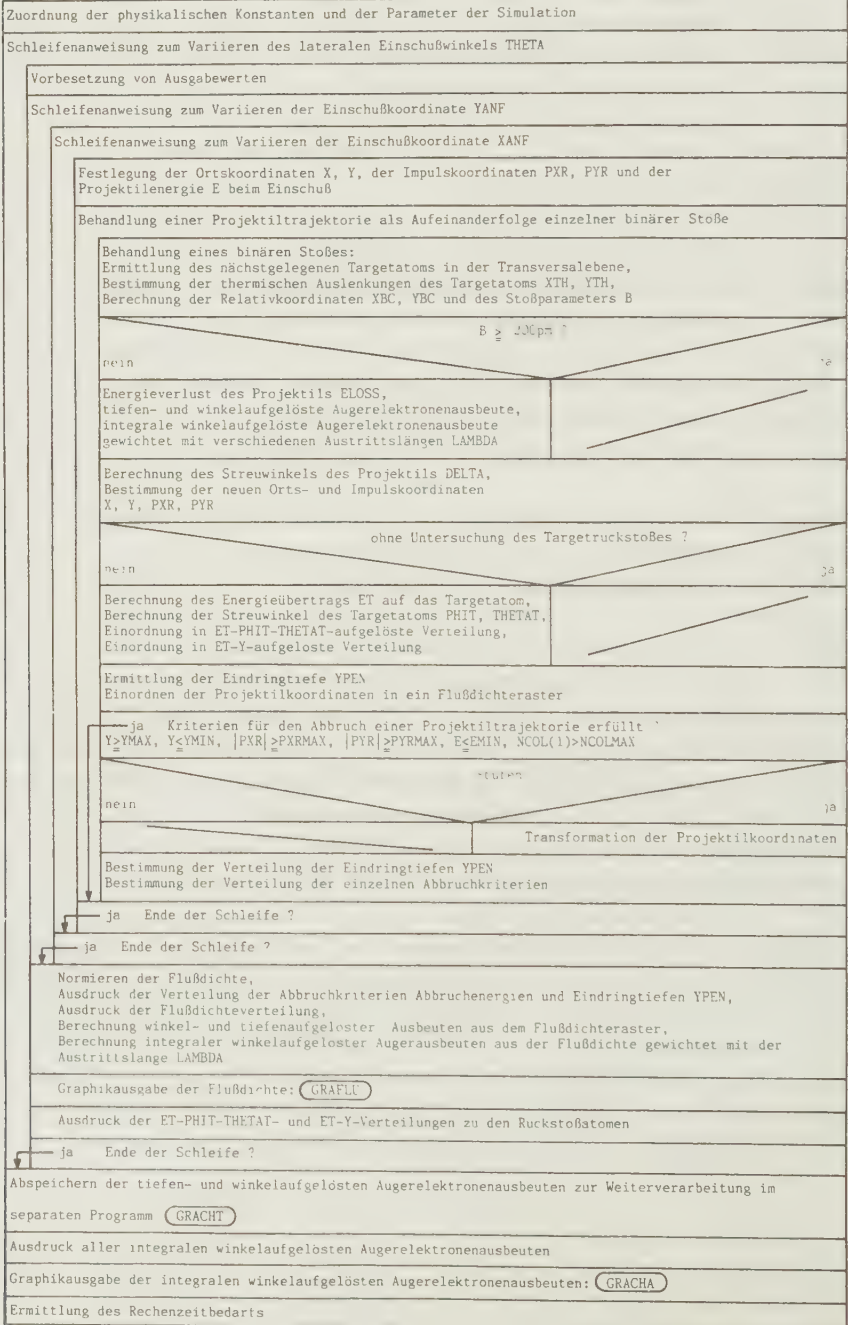
O/Ni(110)-(2x1)-Oberfläche mit Missing-Row-Rekonstruktion:

NIOX001 Protoneneinschuß in [001]-Richtung;

NIOX110 Protoneneinschuß in $[1\bar{1}0]$ -Richtung.

Diese Programme werden mit den Kommandoprozeduren N001, N110, usw. gestartet. Dazu lesen die Programme die benötigten Ionisationswahrscheinlichkeiten aus der Datei TTT. Erstellt wurde die Datei TTT mit den Interpolationsprogrammen INTERL, INTERM und INTERK. Zur graphischen Ausgabe von Ergebnissen des Programms NIO01 dienen die Programme GRACHTA, ... , GRACHTR. Die Analyse der statistischen Fehler der Simulationsrechnung erfolgt mit dem Programm FEHLAN. Die Programme PON001, PON110, usw. liefern die Äquipotentialliniendarstellung der Führungspotentiale. Alle Programme wurden in FORTRAN IV (CDC extended version) verfaßt und an einer Rechenanlage vom Typ Cyber 175 betrieben.

8.1. Struktogramm



8.2. Programm NI001 mit Subroutine GRACHA und GRAFLU

```

1 C
2 C
3 C
4 C
5 C$ PROGRAM NI001 (INPUT=101B, TAPE1=INPUT, OUTPUT, TAPE2=OUTPUT,
6 C$ + TTT, TAPE3=TTT, TAPE4, TAPE5, TAPE6, ZZZG67, TAPE67=ZZZG67)
7 C$ DEBUG
8 C$ ARRAYS
9 C$ STORES (AX,AY,AZ)
10 C
11 C
12 C
13 C
14 C
15 C LETZTE AENDERUNG: 28.05.85
16 C AUTOR: M. SCHUSTER
17 C
18 C
19 C
20 C PROGRAMMBESCHREIBUNG:
21 C =====
22 C
23 C
24 C
25 C DAS PROGRAMM NI001 BERECHNET IONENINDUZIERTER AUGER-ELEKTRONENAUS-
26 C BEUTEN UNTER EINSCHUSSBEDINGUNGEN DER AXIALEN BZW. PLANAREN OBER-
27 C FLAECHENGITTERFUEHRUNG. ALS PROJEKTILE WERDEN PROTONEN Z1=1 AM1=1
28 C MIT EINER ENERGIE E VON 150KEV EINGESCHOSSEN. EINE ERWEITERUNG
29 C FUER ANDERE PROJEKTILE MIT Z1>1 UND HOEHEREN ENERGIEN IST
30 C MOEGLICH. DAZU MUESSEN ALLERDINGS AUCH EINIGE KONSTANTEN,
31 C Z.B. ELOSS, TABION, TIONR, ATFIN GEAENDERT WERDEN.
32 C ALS TARGET DIENST EINE SAUBERE UNREKONSTRUIERTE NI(110)-OBERFLAECHE.
33 C WENN DIE GITTERSTRUKTUR GLEICH IST, KOENNEN DURCH AENDERUNG DER
34 C INVERSEN THOMAS-FERMI-ABSCHIRMLAENGE ATFIN, DER GITTERKONSTANTEN AL
35 C DES ENERGIEVERLUSTES ELOSS, DER THERMISCHEN RMS-AUSLENKUNGEN
36 C UBO, U1X, U1Y, U2X, U2Y UND DER IONISATIONSWAHRSCHEINLICHKEIT
37 C TABION(E,B,ORBITAL) AUCH ANDERE (110)-OBERFLAECHE
38 C SIMULIERT WERDEN.
39 C OBERFLAECHESTUFEN KOENNEN MIT HILFE DES STEUERPARAMETERS NP3 UND
40 C DES STUFENABSTANDS NK [ANZAHL DER TRANSVERSALEBENEN] SIMULIERT
41 C WERDEN.
42 C FUER REKONSTRUIERTE ADSORBATBEDECKTE OBERFLAECHE-MODELLE SIND
43 C ANDERE PROGRAMME ZU WAELHEN, Z.B. NIOX001MR ODER NIOX001ST.
44 C DER IONENEINSCHUSS ERFOLGT LAENGSTENS DER [001]-RICHTUNG IN DER
45 C (110)-OBERFLAECHE, WOBEI DER EINSCHUSSWINKEL PHI ZUR (110)-OBER-
46 C FLAECHE ALS PARAMETER EINGELESEN WIRD UND DER LATERALE EINSCHUSS-
47 C WINKEL THETA(NT) ZUR [001]-RICHTUNG VARIIERT WERDEN KANN (STEUER-
48 C PARAMETER NP4, NP12 UND NEINZ).
49 C FUER DEN EINSCHUSS LAENGSTENS ANDERER NIEDERINDIZIERTER GITTER-
50 C RICHTUNGEN STEHEN ANDERE PROGRAMME, Z.B. NI110, NIOX110MR,
51 C NIOX110ST, NI112, ... ZUR VERFUEGUNG.
52 C DIE IONENSTREUUNG WIRD AUF BINAERE STOEESSE ZWISCHEN PROJEKTIL UND
53 C DEM IN DER JEWELIGEN TRANSVERSALEBENE NAECHSTEN TARGETATOM
54 C ZURUECKGEFUEHRT. DIE STREUWINKEL WERDEN IN EINER APPROXIMATION DER
55 C IMPULSNAEHERUNG BERECHNET.
56 C DAS GITTER FUEHRT THERMISCHE SCHWINGUNGEN AUS, DIE
57 C DURCH GAUSSVERTEILTE RANDOM-AUSLENKUNGEN DER TARGETATOME
58 C BESCHRIEBEN WERDEN. AN DER OBERFLAECHE SIND DIE SCHWINGUNGEN
59 C ANISOTROP.
60 C DER ENERGIEVERLUST DER PROJEKTILE FUER B<2.00A WIRD
61 C ENERGIEABHAENGIG, JEDOCH STOSSPARAMETER-B UNABHAENGIG ANGESETZT.
62 C ES WERDEN DIE RELATIVEN AUSBEUTEN DER AUGER-LINIEN BEI
63 C 61EV (NI M23VV) UND 848EV (NI L3VV) TIEFEN-Y- UND WINKEL-THETA-
64 C AUFGELOEST - AEP(NT,NORBI,MY) - SOWIE INTEGRAL WINKEL-THETA-
65 C AUFGELOEST - FA(NT,NPROF) - ERMITTELT. DIESE BERECHNUNG

```

```

C WIRD AUCH AUF DIE EMISSION VON LEITUNGSBANDELEKTRONEN UEBERTRAGEN. C
C DARAUSS LASSEN SICH AUSSAGEN UEBER DIE WINKEL-THETA-ABHAENIGKEIT C
C DES TARGETSTROMS MACHEN. BEI DER BERECHNUNG DER AUSBEUTEPROFILE C
65 C KOENNEN VERSCHIEDENE AUSTRITTSLAENGEN LAMBDA FUER DEN ELEKTRONEN- C
C AUSTRITT GEWAHLT WERDEN. C
C DIE AUSBEUTEPROFILE KOENNEN UEBER DIE SUBROUTINE GRACHA BZW. UEBER C
C DIE SEPARATEN PROGRAMME GRACHTA, GRACHTB, GRACHTC, GRACHTD, C
C GRACHTP, GRACHTQ, GRACHTR, GRACHTS GRAPHISCH AUSGEGEBEN WERDEN C
70 C (STEUERPARAMETER NP5, NP13). C
C DAS PROGRAMM ERFASST AUCH DIE FLUSSDICHTEVERTEILUNG F(IFL,JFL) DER C
C PROJEKILE IM OBERFLAECENNAHEN BEREICH, BZW. DIE GROEBERE C
C VERTEILUNG ZF(I,J) FUER DIE GRAPHISCHE VERARBEITUNG. DIE FLUSS- C
C DICHTEN WIRD AUF DIE EINFALLENDE FLUSSDICHTEN NORMIERT, WOBEI C
75 C ALLE FLUSSDICHTEN IMMER SENKRECHT ZUR TRANSVERSALEBENE, ALSO C
C NICHT UNBEDINGT SENKRECHT ZUR PROJEKILBEWEGUNG GEMESSEN WERDEN. C
C DIE FLUSSDICHTEN KANN ALS MATRIX ODER GRAPHISCH ALS HOEHENLINIENPLOT C
C MIT HILFE DER SUBROUTINE GRAFLU AUSGEGEBEN WERDEN (STEUERPARAMETER C
C NP6 UND NP7). C
80 C UEBER DIE STEUERPARAMETER NP10, NP11 LASSEN SICH AUCH OPTIONAL C
C VERTEILUNGEN DER ENERGIEUEBERTRAEGE ET AUF DIE TARGETATOME C
C WINKEL-THETA- UND TIEFEN-Y-AUFGELOEST - LET(KET,NNY) - C
C SOWIE WINKEL-THETAT- UND WINKEL-PHIT-AUFGELOEST C
C - NTARGNI(KET,KTHETAT,KPHIT) ERMITTELN. C
85 C DIE BERECHNUNG EINER TRAJEKTORIE WIRD ABGEBROCHEN, WENN EINE DER C
C FOLGENDEN BEDINGUNGEN ERFUELLT IST: Y>YMAX, Y<YMIN, C
C ABS(PXR)>PXRMAX, ABS(PYR)>PYRMAX, E<EMIN, NCOL(1)>NCOLMAX. C
C IN DEN TRANSVERSALEBENEN WIRD EIN KOORDINATENSYSTEM AUFGESPANNT. C
C DIE Z-RICHTUNG IST DIE [001]-RICHTUNG IN DER (110)-OBERFLAECHE. C
90 C DIE Y-RICHTUNG IST DIE [110]-RICHTUNG, D.H. DIE OBERFLAECHE- C
C NORMALE. DIE X-RICHTUNG IST DIE [1-10]-RICHTUNG DER OBERFLAECHE. C
C DER NULLPUNKT DER X-ACHSE LIEGT AUF DER LINKEN SEITE DER EIN- C
C HEITZELLE. DER NULLPUNKT DER Y-RICHTUNG LIEGT IN DER OBERFLAECHE, C
C D.H. BEI DEN GITTERPUNKTEN DER 1. NICKELATOMLAGE. C
95 C IN X- UND Z-RICHTUNG IST DAS GITTER TRANSLATIONSSYMMETRISCH C
C MIT DER GITTERKONSTANTEN AX BZW. AZ. C
C ALLE ENERGIEN VERSTEHEN SICH IN EINHEITEN VON [EV]. C
C DIE LAENGENEINHEIT IST DAS ANGSTROEM [A]. C
C DIE IMPULSE WERDEN IN DER HIER ANGEWANDTEN NAEHERUNG KLEINER C
100 C STREUWINKEL IN EINHEITEN VON [GRAD] GEMESSEN. C
C TEMPERATUREN SIND IN KELVIN [K] GEGEBEN. C
C ZU TESTZWECKEN KANN MAN EINZELNE TRAJEKTORIEN DER PROJEKILE C
C FUER BESTIMMTE EINSCHUSSKOORDINATEN VON TRANSVERSALEBENE ZU C
C TRANSVERSALEBENE VERFOLGEN, WOBEI ALLE WICHTIGEN GROSSEN C
105 C AUSGEDRUCKT WERDEN (STEUERPARAMETER NP9). DIE STARTKOORDINATEN C
C DIESER TRAJEKTORIE WERDEN DURCH IA UND JA FESTGELEGT. C
C MIT DEM STEUERPARAMETER NP8 LAESST SICH EINE UEBERSICHT AUSDRUCKEN, C
C DIE DIE ERGEBNISSE ZU JEDER TRAJEKTORIE ZUSAMMENFASST. C
C
110 C
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC C
C
C PROGRAMM-STEUERPARAMETER NP1...NP15: C
115 C ----- C
C
C EINSCHUSSRICHTUNG NP1 = 0 [001] C
C = 1 [1-10] C
120 C SAUERSTOFF NP2 = 0 OHNE SAUERSTOFF C
C = 1 MIT 1/2ML SAUERSTOFF C
C STUFEN NP3 = 0 OHNE STUFEN C

```

			= 1	MIT 1/2 STUFEN AUFWAERTS.	
			= 2	MIT 1/2 STUFEN ABWAERTS.	
125			= 3	MIT 1/2 STUFEN AUF- UND ABWAERTS.	
			= 4	MIT 1/1 STUFEN AUFWAERTS.	
			= 5	MIT 1/1 STUFEN ABWAERTS.	
			= 6	MIT 1/1 STUFEN AUF- UND ABWAERTS.	
				ABSTAND ZWISCHEN DEN STUFEN: NK	
130	C	THETA	NP4 = 0	EINZELLAUF MIT THETA(NEINZ)	
			= 1	SCHLEIFE MIT NT=1,35 BZW 1,14	
	C	CHANNELING-KURVEN	NP5 = 0	OHNE GRAPH. DARSTELLUNG	
			= 1	MIT GRAPH. DARSTELLUNG	
	C	FLUSSDICHTE-MATRIX	NP6 = 0	OHNE MATRIX-AUSDRUCK	
135			= 1	MIT MATRIX-AUSDRUCK	
	C	FLUSSDICHTE-	NP7 = 0	OHNE GRAPH. HOEHENLINIENDARSTELLUNG	
		HOEHENLINIEN	= 1	MIT GRAPH. HOEHENLINIENDARSTELLUNG	
	C	EINZELERGEBNISSE	NP8 = 0	KEIN AUSDRUCK DER EINZELERGEBNISSE	
			= 1	AUSDRUCK DER EINZELERGEBNISSE	
140		SPUR	NP9 = 0	KEINE AUSGABE DER TEILCHENSPUR	
			= 1	AUSGABE DER TEILCHENSPUR	
				(BEWIRKT: NP4=NP5=NP6=NP7=NP8=0)	
	C	ENERGIEUEBERTRAG	NP10= 0	KEIN AUSDRUCK DER VERTEILUNG	
		AUF TARGETATOME	= 1	AUSDRUCK DER VERTEILUNG DER	
145				ENERGIEUEBERTRAEGE ET	
	C	WINKEL- U. ENERGIE-	NP11= 0	KEINE AUSGABE DER VERTEILUNG	
		VERTEILUNG	= 1	AUSGABE DER VERTEILUNG	
	C	CHANNELING	NP12= 1	AXIALES CHANNELING MIT NT=1,14	
			= 2	PLANARES CHANNELING MIT NT=1,35	
150		AUSBEUTETIEFENPROFIL	NP13= 0	ERZEUGT KEINE DATEI AEP	
			= 1	ERZEUGT DATEI AEP FUER TIEFEN(Y)-	
				UND WINKEL(THETA)-AUFGELOBESTE	
				AUGER-ELEKTRONENAUSBEUTE	
	C	STATISTISCHER	NP14= 0	KEINE ANALYSE DES STATIST. FEHLERS	
155		FEHLER	= 1	ANALYSE DES STATISTISCHEN FEHLERS	
	C	ENERGIEVERLUST	NP15= 0	KEIN ENERGIEVERLUST	
			= 1	ENERGIEVERLUST NUR ENERGIEABHAENGIG	
			= 2	ENERGIEVERLUST ENERGIE- UND STOSS-	
				PARAMETERABHAENGIG	
160					
165					
	C	PROGRAMM NI001: FUER SUBMIT-JOBS		ERFOLGT DIE EINGABE	
		DER DATEN UEBER DIE KOMMANDOPROZEDUREN N001T UND N001.			
	C	SPEZIFIKATION DES SUBMITJOBS:			
		S, T JE NACH ANZAHL DER PROJEKTILE M*N UND DER THETA-WERTE			
170					
	C	CM 377000B WORTE			
		MIT DIESEN KOMMANDOPROZEDUREN WERDEN FOLGENDE PARAMETER DER			
	C	DER SIMULATION FORMATIERT - FORMAT: 99999 - EINGELESEN:			
		PHI,NEINZ,M,N,IA,JA,NK,H,T,BC,			
	C	NP1,NP2,NP3,NP4,NP5,NP6,NP7,NP8,NP9,NP10,NP11,NP12,NP13,NP14,NP15			
175					
180					
	C	IM PROGRAMM VERWANDTE DATEIEN:			
		=====			
	C	TAPE1=INPUT		EINZULESENDE STARTPARAMETER	

```

185 C TAPE2=OUTPUT          OUTPUT
C TAPE3=TTT             DIE DATEI TTT ENTHAELT DIE IONISATIONSWAHR-
C                               SCHEINLICHKEITEN TABION(NEN,NB,NORBI) IN ABHAENGIG-
C                               KEIT DER ENERGIE E UND DEM STOSSPARAMETER B FUER
C                               DIE IONISATION DER
C                               K - SCHALE 1S-ORBITAL (SAUERSTOFF KLL) NORBI=1
190 C                               M23-SCHALE 3P-ORBITAL (NICKEL M23VV) NORBI=2
C                               L3- SCHALE 2P3/2-ORBITAL (NICKEL L3VV) NORBI=3
C                               LEITUNGSBAND (NICKEL) NORBI=4
C TAPE4                 AEP(NT,NORBI,MY) FUER AXIALE GITTERFUEHRUNG
C TAPE5                 AEP(NT,NORBI,MY) FUER PLANARE GITTERFUEHRUNG
195 C TAPE6                 M, N, AFA FUER STATIST. FEHLER DER AUSBEUTE BEI
C                               BESTIMTEM WINKEL THETA
C TAPE67                GRAPHIKUEBERGABEDATEI WIRD VON GRACHA BZW.
C                               GRAFLU GEFUELLT
C
200 C
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C IM PROGRAMM BENUTZTE SUBROUTINEN
205 C =====
C
C GRACHA                 GRAPHIKAUSGABE DER AUSBEUTEPROFILE           QUELLE
C GRAFLU                 GRAPHIKAUSGABE DER FLUSSDICHTEVERTEILUNG     EIGEN
210 C
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
215 C BESCHREIBUNG DER VARIABLEN:
C =====
C
C AE      REAL           IONISATIONSWAHRSCHEINLICHKEIT BEI EINEM STOSS
C AEP     REAL           AUGER-ELEKTRONENAUSBEUTEPROFIL WINKEL- UND TIEFEN-
220 C                               AUFGEOEST
C AES     REAL           AUGER-ELEKTRONENAUSBEUTE GEWICHTET MIT AUSTRITTS-
C                               WAHRSCHEINLICHKEIT (FUER EINE TRAJEKTORIE)
C AFA     REAL           AUGER-ELEKTRONENAUSBEUTE DER EINZELNEN TRAJEKTORIEN
C                               FUER ANALYSE DES STATISTISCHEN FEHLERS DER AUGER-
225 C                               ELEKTRONENAUSBEUTE FUER EINEN BEST. THETA-WERT
C AK      REAL           NORMIERUNGSKONSTANTE DES STOSSP. ENERGIEVERLUSTES
C AL      REAL           GITTERKONSTANTE DES FCC-GITTERS
C AMENERG REAL           MASENFAKTOR FUER KINEMATISCHEN ENERGIEUEBERTRAG
C ATFIN   REAL           INVERSE THOMAS-FERMI-ABSCHIRMLAENGE
230 C AU      INTEGER      TEXT
C AUF     LOGICAL        =.TRUE. AUFWAERTS- =.FALSE. ABWAERTSSTUFE
C AUS     INTEGER        TEXT
C ASEND   INTEGER        TEXT
C AUSENER INTEGER        TEXT
235 C AUSG    INTEGER      TEXT
C AX      REAL           GITTERKONSTANTE IN X-RICHTUNG
C AXIN10  REAL           GITTERKONSTANTE
C AXIN20  REAL           GITTERKONSTANTE
C AX00    REAL           GITTERKONSTANTE
240 C AX0025  REAL           GITTERKONSTANTE
C AX0050  REAL           GITTERKONSTANTE
C AX05    REAL           GITTERKONSTANTE
C AX2     REAL           GITTERKONSTANTE
C AY      REAL           GITTERKONSTANTE IN Y-RICHTUNG

```

245	C	AYIN1	REAL	GITTERKONSTANTE	C
	C	AYIN10	REAL	GITTERKONSTANTE	C
	C	AYIN2	REAL	GITTERKONSTANTE	C
	C	AYIN20	REAL	GITTERKONSTANTE	C
	C	AY00	REAL	GITTERKONSTANTE	C
250	C	AY05	REAL	GITTERKONSTANTE	C
	C	AY2	REAL	GITTERKONSTANTE	C
	C	AZ	REAL	GITTERKONSTANTE IN Z-RICHTUNG	C
	C	AZRAD	REAL	GITTERKONSTANTE	C
	C	B	REAL	STOSSPARAMETER DES PROJEKTILS ZUM NAECHSTEN	C
255	C			TARGETATOM DER BETRACHTETEN TRANSVERSALEBENE	C
	C	BC	REAL	ABSCHNEIDESTOSSPARAMETER	C
	C	DB	REAL	FUER BERECHNUNG DES STREUWINKELS DES PROJEKTILS	C
	C	DBT	REAL	FUER BERECHNUNG DES STREUWINKELS DES TARGETATOMS	C
	C	DD	REAL	EXPONENT	C
260	C	DELTA	REAL	STREUWINKEL DES PROJEKTILS IM LABORSYSTEM	C
	C	DELTAX	REAL	X-INTERVALLBREITE DES EINSCHUSSKOORDINATENRASTERS	C
	C	DELTAY	REAL	Y-INTERVALLBREITE DES EINSCHUSSKOORDINATENRASTERS	C
	C	DYIELD	REAL	ABSOLUTE STATIST. SCHWANKUNG DER AUSBEUTE	C
	C	DYIELDR	REAL	RELATIVE STATIST. SCHWANKUNG DER AUSBEUTE	C
265	C	E	REAL	ENERGIE DES PROJEKTILS	C
	C	EE	REAL	MITTLERE ENERGIE DER PROJEKILE IN ABHAENGIGKEIT	C
	C			DER TIEFE EE(JPL)	C
	C	EIN	REAL	EINSCHUSSENERGIE DES PROJEKTILS	C
	C	ELOSS	REAL	ENERGIEVERLUST	C
270	C	EMIN	REAL	ABBRUCHENERGIE FUER GITTERFUEHRUNG	C
	C	ENDE	INTEGER	KENNZEICHEN FUER DAS ABRUCHKRITERIUM	C
	C	ET	REAL	KINEMATISCHER ENERGIEUEBERTRAG AUF DAS TARGETATOM	C
	C	ETARG	REAL	GESAMT-/MITTLERER ENERGIEUEBERTRAG AUF TARGETATOME	C
	C	F	REAL	FLUSSDICHTEVERTEILUNG F(X,Y)	C
275	C	FA	REAL	AUGER-ELEKTRONENAUSBEUTE FA(THETA)	C
	C	FF	REAL	ANZAHL DER PROJEKILE IN ABHAENGIGKEIT DER TIEFE	C
	C	FFE	REAL	FAKTOR IN DER STREUFORMEL	C
	C	FNORM	REAL	NORMIERUNGSFAKTOR FUER DIE FLUSSDICHTE	C
	C	G1	REAL	GEWICHTSFAKTOR	C
280	C	G2	REAL	GEWICHTSFAKTOR	C
	C	H	REAL	ABSTAND DES ADSORBATATOMS ZUR 1. ATOMLAGE	C
	C	IA	INTEGER	DEFINIERT STARTKOORD. BEI EINZELNER TRAJEKTORIE;	C
	C			IA UND JA SIND AUF EINE RASTERUNG DER EINSCHUSS-	C
	C			KOORDINATEN VON JE 20 INTERVALLEN ABGESTELLT.	C
285	C	IFL	INTEGER	INDEX IM FLUSSDICHTERASTER (X-RICHTUNG)	C
	C	JA	INTEGER	DEFINIERT STARTKOORD. BEI EINZELNER TRAJEKTORIE	C
	C	JFL	INTEGER	INDEX DES FLUSSDICHTERASTERS (Y-RICHTUNG)	C
	C	JFLANF	INTEGER	INDEX DER OBERSTEN FLUSSDICHTERASTERZELLE	C
	C	JFLEND	INTEGER	INDEX DER UNTERSTEN FLUSSDICHTERASTERZELLE	C
290	C	K	INTEGER	ANZAHL DER FLUSSDICHTERASTERZELLEN PRO AX	C
	C	KET	INTEGER	DISKRETISIERTER ENERGIEUEBERTRAG	C
	C	KK	INTEGER	ANZAHL DER TRANSVERSALEBENEN AB DER LETZTEN STUFE	C
	C	KPHIT	INTEGER	DISKRETISIERTER STREUWINKEL PHIT	C
	C	KTHETAT	INTEGER	DISKRETISIERTER STREUWINKEL THETAT	C
295	C	L	INTEGER	ANZAHL DER FLUSSDICHTERASTERZELLEN PRO AY	C
	C	LAMBDA	REAL	AUSTRITTSLAENGE DER ELEKTRONEN	C
	C	LAMINV	REAL	INVERSE AUSTRITTSLAENGE DER ELEKTRONEN	C
	C	LEITB	INTEGER	TEXTVARIABLE	C
	C	LET	INTEGER	DISKRETISIERTER ENERGIEUEBERTRAG ET	C
300	C	LT1	INTEGER	DISKRETISIERTE EINDRINGTIEFE YPEN	C
	C	LT10	INTEGER	DISKRETISIERTE EINDRINGTIEFE YPEN	C
	C	M	INTEGER	ANZAHL DER EINSCHUSSPROJEKILE PRO EINHEITSZELLE AX	C
	C	MA	INTEGER	UNTERE GRENZE DES INDEX IZ	C
	C	ME	INTEGER	OBERE GRENZE DES INDEX IZ	C
305	C	MSTR	INTEGER	STREUPARTNER =1: OX, 2: NI, 3:NIRE	C

	C	MY	INTEGER	DISKRETISIERTE TIEFE Y	C
	C	N	INTEGER	ANZAHL DER EINSCHUSSPROJEKILE PRO EINHEITSZELLE AZC	C
	C	NAK	LOGICAL	EBENENAUSWAHL =.TRUE.: 1.EBENE, .FALSE.: 2.EBENE	C
	C	NA	INTEGER	UNTERE GRENZE DES INDEX JZ	C
310	C	NATOM	INTEGER	TARGETATOM =1: SAUERSTOFF, 2: NICKEL	C
	C	NB	INTEGER	DISKRETISIERTER STOSSPARAMETER B	C
	C	NCOL	INTEGER	ANZAHL DER STOSSE	C
	C	NCOLMAX	INTEGER	MAXIMAL ZULAESSIGE STOSSZAHL	C
	C	NENER	INTEGER	VERTEILUNG DER ENERGIEN RUECKGESTREUTER PROJEKILE	C
315	C	NEINZ	INTEGER	BESTIMMT INDEX NT BEI EINZELNER TRAJEKTORIE	C
	C	NEN	INTEGER	DISKRETISIERTE ENERGIE	C
	C	NENERG	INTEGER	ANZAHL DER ABRUECHE AUFGRUND DES ENERGIE-	C
	C			KRITERIUMS: E<EMIN	C
	C	NE	INTEGER	OBERE GRENZE DES INDEX JZ	C
320	C	NI	INTEGER	TEXTVARIABLE	C
	C	NIRE	INTEGER	TEXTVARIABLE	C
	C	NI 61	INTEGER	TEXTVARIABLE	C
	C	NI848	INTEGER	TEXTVARIABLE	C
	C	NK	INTEGER	ANZAHL DER TRANSVERSALEBENEN VON STUFE ZU STUFE	C
325	C	NNY	INTEGER	DISKRETISIERTE TIEFE Y	C
	C	NORBI	INTEGER	IONISIERTES ORBITAL	C
	C			K - SCHALE 1S-ORBITAL (SAUERSTOFF KLL) NORBI=1	C
	C			M23-SCHALE 3P-ORBITAL (NICKEL M23VV) NORBI=2	C
	C			L3- SCHALE 2P3/2-ORBITAL (NICKEL L3VV) NORBI=3	C
330	C			LEITUNGSBAND (NICKEL) NORBI=4	C
	C	NORBIT	INTEGER	IONISIERTES ORBITAL	C
	C			K - SCHALE 1S-ORBITAL (SAUERSTOFF KLL) NORBI=1	C
	C			M23-SCHALE 3P-ORBITAL (NICKEL M23VV) NORBI=2	C
	C			L3- SCHALE 2P3/2-ORBITAL (NICKEL L3VV) NORBI=3	C
335	C			LEITUNGSBAND (NICKEL) NORBI=4	C
	C	NPROF	INTEGER	INDEX FUER AUGER-AUSBEUTEPROFIL	C
	C	NPROF1	INTEGER	GRENZE DES INDEX NPROF	C
	C	NPROF2	INTEGER	GRENZE DES INDEX NPROF	C
	C	NPROF3	INTEGER	GRENZE DES INDEX NPROF	C
340	C	NPROF4	INTEGER	GRENZE DES INDEX NPROF	C
	C	NPXR	INTEGER	ANZAHL DER ABRUECHE AUFGRUND EINES AUSBRECHENS	C
	C			AUS DER GITTERFUEHRUNGSRICHTUNG (X-RICHTUNG)	C
	C	NPYR	INTEGER	ANZAHL DER ABRUECHE AUFGRUND EINES AUSBRECHENS	C
	C			AUS DER GITTERFUEHRUNGSRICHTUNG (Y-RICHTUNG)	C
345	C	NP1	INTEGER	PROGRAMM-STEUERPARAMETER, BESCHREIBUNG SIEHE OBEN	C
	C	...		...	C
	C	NP15	INTEGER	PROGRAMM-STEUERPARAMETER, BESCHREIBUNG SIEHE OBEN	C
	C	NRANF	INTEGER	INDEX FUER ZUFALLSZAHLEN XRAY, YRAY	C
350	C	NRUECK	INTEGER	ANZAHL DER ABRUECHE AUFGRUND VON RUECKSTREUUNG	C
	C	NSTUF	INTEGER	TEXT	C
	C	NT	INTEGER	INDEX FUER WINKEL THETA(NT)	C
	C	NTA	INTEGER	UNTERE GRENZE DES INDEX NT	C
	C	NTE	INTEGER	OBERE GRENZE DES INDEX NT	C
	C	NTARGNI	INTEGER	ANZAHL DER STOSSE MIT (1) SAUERSTOFF (2) NICKEL	C
355	C	NTIEFE	INTEGER	ANZAHL DER ABRUECHE AUFGRUND DES TIEFENKRITERIUMS	C
	C	NT1	INTEGER	VERTEILUNG DER EINDRINGTIEFEN DER PROJEKILE	C
	C	NT10	INTEGER	VERTEILUNG DER EINDRINGTIEFEN DER PROJEKILE	C
	C	OGY	REAL	OBERE GRENZE DES FEINEN FLUSSDICHTERASTERS	C
	C	OGYV	REAL	OBERE GRENZE DES GROEBEREN FLUSSDICHTERASTERS	C
360	C	OX	INTEGER	TEXTVARIABLE	C
	C	OX510	INTEGER	TEXTVARIABLE	C
	C	PHI	REAL	EINSCHUSSWINKEL DES PROJEKTILS ZUR (110)-OBERFL.	C
	C	PHIT	REAL	STREUWINKEL DES TARGETATOMS ZUR (110)-OBERFL.	C
	C	PI	REAL	KONSTANTE	C
365	C	PXR	REAL	X-IMPULSKOMPONENTE / WINKEL ZUR [001]-RICHTUNG	C
	C	PXRMAX	REAL	GRENZWERT DER X-IMPULSKOMPONENTE	C


```

LOGICAL NAK, AUF
REAL LAMBDA(25), LAMINV(25)
430 INTEGER OX, OX510, AUS(3), ENDE, AUSG(2,25), AU(2,4), AUSEND(6),
+ AUSENER(3,5)
DIMENSION F(20,102),ATFIN(2),FFE(2),TABION(20,100,4),AE(12),
+ ELOSS(20), NORBIT(12), NT1(11), NT10(11), Z2(2),
+ NENER(20), AES(12), NCOL(3), XLAN(10000), YLAN(10000),
435 + LET(215,23), ETARG(2), NTARGNI(5,8,4), AMENERG(2), FET(215),
+ AEP(35,4,100), EE(102), FF(102),
+ THETA1(14), THETA2(35),
+ AFA(160,160)
COMMON /GFL/ ZF(10,26),FNORM
440 COMMON /GCH/ THETA(35), FA(35,25), AUSG, LAMBDA, NTE, NP12
COMMON /ALL/ AX, AX2, AY, AY2, H, T, PHI, NK, NSTUF(7), NP3

C
C
C
445 C PROGRAMM-LAUFZEITMESSUNG
TIME1=SECOND(V)

C
C
C
450 C PHYSIKALISCHE KONSTANTEN UND PARAMETER DES EXPERIMENTS:
=====
C
C
C
DATA EIN,Z1,Z2(1),Z2(2), AL,YMAX, YMIN, UBO,PXRMAX,PYRMAX
455 + /150000.,1., 8., 28.,3.524, 10.,-1000.,0.004, 30., 30./

C
C ENERGIEVERLUST NACH ZIEGLER (STOSSPARAMETERUNABHAENGIG,
C RANDOM-RICHTUNG, SUMME UEBER ALLE TEILBEITRAEGE
C ZUM ENERGIEVERLUST). DER ABSTAND DER STREUEBENEN AZ/2
460 C IST BEREITS BERUECKSICHTIGT. BEI AENDERUNG VON AZ MUSS
C AUCH ELOSS(NEN) GEANDERT WERDEN!
DATA (ELOSS(I),I=1,20)/
+ 16.05, 20.06, 25.68, 28.90, 31.46, 33.70, 35.31, 36.92,
+ 37.88, 38.86, 39.16, 40.13, 40.45, 40.77, 40.77, 40.93,
465 + 40.93, 40.93, 40.77, 40.61/

C
DATA AUS/5H OX ,5H NI ,5H NIRE/

C
DATA AUSEND /7H RUECK,7H TIEFE,7H PXR ,7H PYR ,
470 + 7H ENERG,7H NCOL /

C
DATA ((AUSENER(I,J),J=1,5),I=1,3)
+ /10HENERGIEVER,10HLUST NULL ,10H ,10H ,
+ 10H ,
475 + 10HENERGIEVER,10HLUST NUR E,10HNERGIEABHA,10HENGIG ,
+ 10H ,
+ 10HENERGIEVER,10HLUST ENERG,10HIE-UND STO,10HSSPARAMETE,
+ 10HRABHAENGIG/

C
480 C DATA NSTUF/
+ 5H OHNE,5H +1/2,5H -1/2,5H +-1/2,5H +1/1,5H -1/1,5H +-1/1/

C
DATA OX, NI, NIRE,OX510,NI 61,NI848,LEITB
+ / 1, 2, 3, 1, 2, 3, 4/

485 C
C EINLESEN DER PARAMETER DER SIMULATION
READ(1,99999)PHI,NEINZ,M,N,IA,JA,NK,H,T,BC,
+ NP1,NP2,NP3,NP4,NP5,NP6,NP7,NP8,NP9,NP10,NP11,NP12,NP13,NP14,NP15

```

```

99999 FORMAT(1H ,F4.2,I6,4I3,I4,F6.3,F5.0,F5.2,1X,5(3I1,1X))
490 READ (3,*) TABION
C IONISATIONSWAHRSCHEINLICHKEITEN TABION(ENERGIE,STOSSP.,ORBITAL)
C ENERGIE 1,20 E(1)=7500EV, E(2)=15000EV, ..., E(20)=150000EV
C STOSSPARAMETER 1,100 B(1)=0.010A, B(2)=0.030A,..., B(100)=1.990A
C K - SCHALE 1S-ORBITAL (SAUERSTOFF KLL) NORBI=1
495 C M23-SCHALE 3P-ORBITAL (NICKEL M23VV) NORBI=2
C L3- SCHALE 2P3/2-ORBITAL (NICKEL L3VV) NORBI=3
C LEITUNGSBAND (NICKEL) NORBI=4
C WRITE (2,99990) (((TABION(NEN,NB,NORBI),NEN=11,20),
C + NB=1,100),NORBI=1,4)
500 C99990 FORMAT (1H0,* TABION*/1H0,4(100(10X,10E12.4/1H )/1H0))
C
C KONTROLLAUSDRUCK DER EINGELESENEN PARAMETER
WRITE(2,99999)PHI,NEINZ,M,N,IA,JA,NK,H,T,BC,
+ NP1,NP2,NP3,NP4,NP5,NP6,NP7,NP8,NP9,NP10,NP11,NP12,NP13,NP14,NP15
505 WRITE (2,99998) BC
99998 FORMAT (1H ,*ABSCHNEIDEN DER ANREGUNGSFUNKTION BEI BC=*,
+ F5.2,*A*)
WRITE(2,99997)EIN,PHI,M,N
99997 FORMAT(1H ,F8.0,*EV PROTONEN GESTREUT AN EINER NI(110)-*,
510 + *OBERFLAECHE*/1H ,*PHI =*,F5.2,* ; M =*,I3,* ; N =*,I3)
WRITE(2,99996)
99996 FORMAT(* EINSCHUSSRICHTUNG : [001]*)
IF (NP3 .EQ. 0) NK=0
WRITE (2,99995) NSTUF(NP3+1),NK
515 99995 FORMAT(1H ,A5,* STUFEN ,STUFENABSTAND : NK=*,I4,* STOESSE*)
IF (T.EQ.0.) GOTO 10
WRITE(2,99994)T
99994 FORMAT(* ANISOTROPE GITTERSCHWINGUNGEN, T=*,F5.0,*K*)
GOTO 20
520 10 WRITE(2,99993)
99993 FORMAT(* STARRES GITTER*)
20 WRITE(2,99992) (AUSENER(NP15+1,J),J=1,5)
99992 FORMAT(1H ,5A10)
WRITE(2,99991)
525 99991 FORMAT(* OHNE SAUERSTOFF*)
C
C
C GESTEUERTE VORBESETZUNG:
C =====
530 C
DATA (THETA1(NT),NT=1,14)
+ / 0.00,0.25,0.50,0.75,1.00,
+ 1.25,1.50,2.00,2.50,3.00,3.50,4.00,5.00,6.00/
DATA (THETA2(NT),NT=1,35)
535 + / 0.00,0.25,0.50,0.75,1.00,
+ 1.25,1.50,1.75,2.00,2.25,2.50,2.75,3.00,3.25,3.50,
+ 3.75,4.00,4.25,4.50,4.75,5.00,5.50,6.00,6.50,7.00,
+ 7.50,8.00,8.50,9.0,9.5,10.0,10.5,11.0,11.5,12.0/
IF (NP12 .EQ. 2) GOTO 40
540 NTA=1
NTE=14
DO 30 NT=NTA,NTE
30 THETA(NT)=THETA1(NT)
GOTO 60
545 40 NTA=1
NTE=35
DO 50 NT=NTA,NTE
50 THETA(NT)=THETA2(NT)
60 CONTINUE

```

C
C
C
C
C

```

550      IF (NP4 .EQ. 0) NTA=NTE=NEINZ
          NA=1
          NE=N
          MA=1
          ME=M

555  C
      C      KONTROLLE DER STEUERPARAMETER NP1, ..., NP15:
          NCOLMAX=5000
          IF (NP1 .NE. 0) STOP "FALSCH EINSCHUSSRICHTUNG"
          IF (NP2 .NE. 0) STOP "FALSCH BEDECKUNG"
560      IF (NP9 .EQ. 0) GOTO 90
      C      BEI DER VERFOLGUNG EINER EINZELTRAJEKTORIE GELTEN
      C      FOLGENDE VOREINSTELLUNGEN:
          NP4=0
          NP5=0
565      NP6=0
          NP7=0
          NP8=0
          NP14=0
          NCOLMAX=500
570  C      IA UND JA SIND AUF EINE RASTERUNG DER EINSCHUSSKOORDINATEN
      C      VON JE 20 INTERVALLEN ABGESTELLT:
          NA=JA
          NE=JA
          MA=IA
575      ME=IA
          M=20
          N=20

      C
      C
580  C      GRENZWERT FUER DIE PROJEKTIENERGIE:
      90      EMIN= 5050.
      C      IF (NP12 .EQ. 1) EMIN=30050.
      C
      C
585  C      BERECHNUNG GAUSSVERTEILTER ZUFALLSZAHLEN:
      C      =====
      C
      C      ES WERDEN JE ZWEI UNABHAENGIGE (1,0) NORMALVERTEILTE ZUFALLS-
      C      ZAHLEN ERZEUGT, D.H. NORMIERTE GAUSS-VERTEILUNG MIT STANDARD-
590      ABWEICHUNG 1 UND MITTELWERT 0.
      C      POLARE METHODE
      C      (FUER THERMISCHE GITTERSCHWINGUNGEN)
      C
      DO 110 NRANF=1,10000
595  100      XNAN(NRANF)=2.*RANF(0)-1.
          YNAN(NRANF)=2.*RANF(0)-1.
          SQARSUM=XNAN(NRANF)*XNAN(NRANF)+YNAN(NRANF)*YNAN(NRANF)
          IF (SQARSUM .GE. 1.) GOTO 100
          SQARSUM=SQRT(-2.*ALOG(SQARSUM)/SQARSUM)
600      XNAN(NRANF)=XNAN(NRANF)*SQARSUM
          YNAN(NRANF)=YNAN(NRANF)*SQARSUM
      110
      C
      C
605  C
      C      GITTER- UND ATOMDATEN VON NICKEL UND SAUERSTOFF:
      C      =====
      C
      C      MITTLERE THERMISCHE AUSLENKUNGSQUADRAT DES NICKELGITTERS.
610  C      DER TEMPERATURABHAENGIGKEIT DER THERMISCHEN AUSLENKUNGEN

```

C
C
C
C
C

C
C
C
C
C

```

C      IST DIE DEBYE'SCHE HOCHTEMPERATURNAEHERUNG ZUGRUNDE GELEGT.
C      DIESE NAEHERUNG IST AUCH FUER T<DEBYE-TEMPERATUR GENAUER
C      ALS 10% SOLANGE T>DEBYE-TEMPERATUR/2.
C      FUER T=0. WIRD MIT EINEM STARREN GITTER GERECHNET.
615 C      DIE WERTE FUER DIE OBERFLAECHEN STAMMEN VON ROVIDA.
        UBULK=UB0*SQRT(T)
        U1X=1.15*UBULK
        U2X=1.02*UBULK
        U1Y=1.79*UBULK
620 C      U2Y=1.21*UBULK
C
C      GITTERKONSTANTEN VON NICKEL:
        AX=AL/SQRT(2.)
        AY=AL/SQRT(2.)
625 C      AZ=AL
        AX2  =AX*0.5
        AX00 =AX*10000.
        AX05 =AX*10000.5
        AX0050=AX*10000.05
630 C      AX0025=AX*10000.025
        AXIN20=20./AX
        AXIN10=10./AX
        AY2  =AY*0.5
        AY00 =AY*10000.
635 C      AY05 =AY*10000.5
        AYIN20=20./AY
        AYIN10=10./AY
        AYIN2 = 2./AY
        AYIN1 = 1./AY
640 C      PI=2.*ASIN(1.)
        RAD  =PI/180.
        AZRAD =AZ*RAD*0.5
C      INTERVALLBREITE DES EINSCHUSSKOORDINATENRASTERS IN X-RICHTUNG:
        DELTAX=AX/M
645 C      NORMIERUNGSKONSTANTE FUER ENERGIEVERLUST BEI EINSCHUSS IN
C      [001] AK=5.02          [1-10] AK=6.53
        AK=5.02
C
C      MASSENFaktor FUER ENERGIEUEBERTRAG:
650 C      AMENERG(OX)=2.*1.*16./((1.+16.))**2
        AMENERG(NI)=2.*1.*58.7/((1.+58.7))**2
        NRANF=1
C      NCOL(1) : ANZAHL ALLER STOESE EINES PROJEKTI LS (SPUR)
C      NCOL(2) : ANZAHL ALLER STOESE FUER EINEN THETA-WERT
655 C      NCOL(3) : ANZAHL ALLER STOESE IM GANZEN PROGRAMM
        NCOL(3)=0
C
C      INVERSER THOMAS-FERMI-RADIUS IN [1/ANGSTROM] FUER PROJEKTI LS
C      MIT Z1=1. (PROTONEN). SONST IST EINE ANDERE FORMEL ZU WAELHEN.
660 C      ATFIN(NI)=Z2(NI)**(1./3.)/0.4685
        ATFIN(OX)=Z2(OX)**(1./3.)/0.4685
C      ATFIN(NI)=6.4893
C      ATFIN(OX)=4.2735
C      FAKTOR FUER STREUFORMEL:
665 C      FFE(NI)=14.388*Z1*Z2(NI)*ATFIN(NI)/RAD
        FFE(OX)=14.388*Z1*Z2(OX)*ATFIN(OX)/RAD
C
C      WELCHE AUGER-ELEKTRONENAUSBEUTEPROFILE SIND ZU ERFASSEN ?
C      NPROF2 GIBT DIE ANZAHL DER ZU BEARBEITENDEN KOMBINATIONEN VON
670 C      IONISIERTEM ORBITAL NORBIT(NPROF) UND AUSTRITTSLAENGE
C      LAMBDA(NPROF) AN. NPROF2 MUSS KLEINER GLEICH 12 SEIN.

```

```

C      DIE AUGER-AUSBEUTEN NPROF=NPROF1,...,NPROF2 WERDEN AUS DEN
C      IONISATIONSWAHRSCHEINLICHKEITEN BEI JEDEM STOSS BERECHNET.
C      DIE AUSBEUTEN NPROF=13,14,15 SIND DIE FLUSSDICHTEN AM ATOMORT
675 C      GEWICHTET MIT DER AUSTRITTSWAHRSCHEINLICHKEIT, DIE DER TIEFE
C      DER JEWEILIGEN ATOMLAGE UND DER AUSTRITTSLAENGE
C      LAMBDA(NPROF) ENTSPRICHT.
C      DIE AUSBEUTEN NPROF=NPROF3,...NPROF4 GEBEN DIE FLUSSDICHTEN
C      AM ATOMORT IN JEWEILS EINER ATOMLAGE AN. DABEI IST
C      NPROF=16 FLUSSDICHTEN AM ORT DES SAUERSTOFFATOMS
680 C      NPROF=17 FLUSSDICHTEN AM ORT DES NICKELATOMS IN DER REK. ATOMLAGE
C      NPROF=18 FLUSSDICHTEN AM ORT DES NICKELATOMS IN DER 1. ATOMLAGE
C      NPROF=25 FLUSSDICHTEN AM ORT DES NICKELATOMS IN DER 8. ATOMLAGE
C      NPROF3 MUSS GROESSER GLEICH 16 UND NPROF4 KLEINER GLEICH 25
685 C      GEWAHLT WERDEN.
C      NPROF1=1
C      NPROF2=12
C      NPROF3=16
C      NPROF4=25
690 C      LAMBDA: MITTLERE FREIE WEGLAENGEN DER ELEKTRONEN IN ANGSTROM
C      DATA (LAMBDA(NPROF),NPROF=1,25),(NORBIT(NPROF),NPROF=1,12)
C      +/ 1., 2., 4., 8., 15., 1., 4., 15., 40., 15., 40.,100.,
C      + 4., 15., 40.,
C      + 10*1.E+9,
695 C      + 2, 2, 2, 2, 2, 3, 3, 3, 3, 4, 4, 4, 4 /
C      NORBIT: 1=O-K-SCHALE, 2=NI-M23-SCHALE, 3=NI-L3-SCHALE, 4=LEITB
C      DER WERT 1E9 HAT KEINE PHYSIKALISCHE BEDEUTUNG, ER SOLL LEDIGLICH
C      DAS FORMAT SPRENGEN UND SICH SO VON DEN UEBRIGEN WERTEN ABHEBEN
C      DO 120 NPROF=1,25
700 120 LAMINV(NPROF)=1./LAMBDA(NPROF)
C      WRITE (2,99989) (LAMBDA(NPROF),NPROF=1,15),
C      + (NORBIT(NPROF),NPROF=1,12)
99989 FORMAT (* MITTLERE FREIE WEGLAENGEN IN ANGSTROM*/1H ,
C      + 15F8.2/1H ,12(I5,3X))
705 C
C
C      AUSDRUCKTEXT FUER AUGER-ELEKTRONENAUSBEUTEN:
C      =====
C
710      DATA ((AU(I,J),I=1,2),J=1,4)
C      +/10HAUGERLINIE,10H OX 510 EV,
C      + 10HAUGERLINIE,10H NI 61 EV,
C      + 10HAUGERLINIE,10H NI 848 EV,
C      + 10HLEITUNGS ,10HBAND ELEKT/
715      DO 130 J=1,12
C      AUSG(1,J)=AU(1,NORBIT(J))
130      AUSG(2,J)=AU(2,NORBIT(J))
C      DATA ((AUSG(I,J),I=1,2),J=13,15)
C      +/10HFLUSS BEI ,10HNICKEL GEW,
720      + 10HFLUSS BEI ,10HNICKEL GEW,
C      + 10HFLUSS BEI ,10HNICKEL GEW/
C      DATA ((AUSG(I,J),I=1,2),J=16,25)
C      +/10HFLUSS BEI ,10HSAUERSTOFF,
C      + 10HFLUSS BEI ,10HNICKEL REK,
725      + 10HFLUSS BEI ,10HNICKEL 1.L,
C      + 10HFLUSS BEI ,10HNICKEL 2.L,
C      + 10HFLUSS BEI ,10HNICKEL 3.L,
C      + 10HFLUSS BEI ,10HNICKEL 4.L,
C      + 10HFLUSS BEI ,10HNICKEL 5.L,
730      + 10HFLUSS BEI ,10HNICKEL 6.L,
C      + 10HFLUSS BEI ,10HNICKEL 7.L,
C      + 10HFLUSS BEI ,10HNICKEL 8.L/

```

C
C
C
C
C

```

C
C
735 C BERECHNEN DER GRENZEN DES FLUSSDICHTERASTERFELDES:
C =====
C
C      JFLANF=1
C      JFLEND=(NPROF4-17)*10+22
740 C FLUSSDICHTERASTERUNG IN K=20 ZELLEN / EINHEITSZELLE AX
C FLUSSDICHTERASTERUNG IN L=20 ZELLEN / EINHEITSZELLE AY
C GRENZEN DES FLUSSDICHTERASTERFELDES IN Y-RICHTUNG :
C      K=20
C      L=20
745 C DAS FEINE FLUSSDICHTERASTERFELD REICHT
C      VON OGY= 2.5625A= 1.025*AY (INDEX=1)
C      BIS UGY= -3.9375A=-1.575*AY (INDEX=52)
C      BZW BIS UGY= -8.9375A=-3.575*AY (INDEX=92)
C      BZW BIS UGY=-10.1875A=-4.075*AY (INDEX=102)
750 C MITTE DER RASTERZELLEN
C      OBERSTE      2.5000A= 1.000*AY (INDEX=1)
C      (INDEX=51)   -3.7500A=-1.500*AY (INDEX=51)
C      (INDEX=91)   -8.7500A=-3.500*AY (INDEX=91)
C      (INDEX=101)  -10.0000A=-4.000*AY (INDEX=101)
755 C      (INDEX=102) -10.1250A=-4.050*AY (INDEX=102)
C      HOEHE EINER FEINEN RASTERZELLE      0.1250A= 0.050*AY
C      FEINES FLUSSDICHTERASTER FUER AUSBEUTE UND MATRIXAUSDRUCK:
C      OGY=AY2*(21-JFLANF+0.5)/10.
C      UGY=AY2*(21-JFLEND-0.5)/10.
760 C GROEBERES FLUSSDICHTERASTER FUER GRAPHIK:
C      OGYV=AY*1.05
C      UGYV=-AY*1.55
C
C
765 C BEGINN DER SCHLEIFE ZUM VARIIEREN DES EINSCHUSSWINKELS THETA(NT):
C -----
C
C      TRAJEKTORIE EINES EINZELNEN PROJEKTILOS
C      DO 790 NT=NTA,NTE
770 C WRITE(2,99988) THETA(NT)
C 99988 FORMAT(1H0,* THETA =*,F5.2,* :*/1H ,* -----*/1H )
C
C
C      VORBESETZUNG DER VARIABLEN:
775 C =====
C
C      DO 150 I=1,215
C      DO 140 J=1,23
140 C LET(I,J)=0
780 C 150 CONTINUE
C      ETARG(NI)=0.
C      NCOL(2)=0
C      DO 160 NEN=1,20
160 C NENER(NEN)=0
C      DO 170 I=1,11
785 C NT1(I)=0
C      NT10(I)=0
170 C DO 190 JFL=JFLANF,JFLEND
C      FF(JFL)=0.
790 C EE(JFL)=0.
C      DO 180 IFL=1,20
180 C F(IFL,JFL)=0.
190 C CONTINUE

```

```

795      DO 210 J=1,26
200      DO 200 I=1,10
210      ZF(I,J)=0.
      CONTINUE
      DO 240 KPHIT=1,4
      DO 230 KTHETAT=1,8
800      DO 220 KET=1,5
220      NTARGNI(KET,KTHETAT,KPHIT)=0
230      CONTINUE
240      CONTINUE
      DO 250 NPROF=NPROF1,NPROF2
805      FA(NT,NPROF)=0.
      DO 270 NORBI=1,4
      DO 260 MY=1,100
260      AEP(NT,NORBI,MY)=0.
270      CONTINUE
810      DO 274 J=1,160
      DO 272 I=1,160
      AFA(I,J)=0.
272      CONTINUE
274      CONTINUE
815      NTIEFE=0
      NENERG=0
      NPXR=0
      NPYR=0
      NRUECK=0
820      C
      C      INTERVALLBREITE DES EINSCHUSSKOORDINATENRASTERS IN Y-RICHTUNG:
      C      DELTAY=TAND(PHI)*AZ/(COSD(THETA(NT))*N)
      C      IF (NP8.EQ.1) WRITE(2,99987)
99987      FORMAT(1H0//4H  I,3H  J,7H  XANF ,7H  PXR ,7H  PYR ,
825      + 7H  PR ,7H  E ,8H  NCOL,8H  YPEN,8H  Y ,7H  ENDE ,
      + 3X,12H AES(OX510) ,12H AES(NI 61) ,12H AES(NI848) ,
      + 12H AES(LEITB) /1H )
      C      IF (NP9 .EQ. 1) WRITE(2,99986)
99986      FORMAT (1H0,4HNCOL,5H MSTR,7H  X ,7H  Y ,
830      + 6H  XC ,6H  YC ,6H  XZELL,5H XTH ,5H YTH ,5H  S ,
      + 7H  PXR ,7H  PYR ,6H  E ,7H  ELOSS,
      + 40H AE: 61 NI848 LEITB AES: 61 848 LEITB ,
      + 2H E,3H SP,2H A/1H )
      C
835      C
      C      BEGINN DER SCHLEIFEN ZUM VARIIEREN DER EINSCHUSSKOORDINATEN X, Y:
      C      =====
      C
      C      PROGRAMM-LAUFZEITMESSUNG:
840      TIME2=SECOND(V)
      C      SCHLEIFE: EINSCHUSS Y-KOORDINATE JZ=NA,NE
      C      SCHLEIFE: EINSCHUSS X-KOORDINATE IZ=MA,ME
      DO 710 JZ=NA,NE
      DO 700 IZ=MA,ME
845      C
      C      VORBESETZUNGEN:
      C      XANF=(IZ-1)*DELTAX
      C      IF (NP3 .EQ. 0) GOTO 280
      C      YANF=YMAX
850      KK=JZ*NK/N
      C      GOTO 290
280      YANF=YMAX-(JZ-1)*DELTAY
290      X=XANF
      Y=YANF

```

```

855      YPEN=Y
          NCOL(1)=0
          AUF=.FALSE.
          PKR=THETA(NT)
          PYR=-PHI
860      NAK=.FALSE.
          E=EIN
          XTH=0.
          YTH=0.
          DO 300 NPROF=NPROF1,NPROF2
865 300    AES(NPROF)=0.
          C
          C
          C BEGINN DER BEHANDLUNG EINES BINAEREN STOSSES:
          C =====
870      C
          C
          C
          C BESTIMMUNG DES STREUPARTNERS UND DER RELATIVKOORDINATEN:
          C =====
875      C
          C      D.H. DES NAECHSTEN TARGETATOMS IN DER AUGENBLICKLICHEN
          C      TRANSVERSALEBENE.
          C      MSTR=OX, NI ODER NIRE UND NATOM=OX ODER NI :
          C
880      C      KOORDINATENSYSTEM DER TRANSVERSALEBENE X UND Y:
          C      DER NULLPUNKT DER X-ACHSE LIEGT AUF DER LINKEN SEITE DER
          C      EINHEITSZELLE. XZELL IST DIE AUF DIE EINHEITSZELLE AX=2.5A
          C      TRANSFORMIERTE X-KOORDINATE MIT XZELL(X=0.)=0.
          C      310 XZELL=AMOD(X+AX00,AX)
885      C      NAK=.NOT.NAK
          C      DIE ALLERERSTE STREUEBENE IST DIE EBENE 1 (FOLGE:121212...)
          C      IF (NAK) GOTO 330
          C
          C
890      C      EBENE 2 ,NAK=.FALSE.
          C      XC=AMOD(X+AX05,AX)-AX2
          C      IF (Y .LE. 0) GOTO 320
          C
          C      Y>0
895      C      STREUUNG AN NICKELATOM NI
          C      YC=Y+AY2
          C      GOTO 350
          C
          C      Y<=0
900      C      STREUUNG AN NICKELATOM NI
          C      320 YC=AMOD(Y+AY00,AY)-AY2
          C      GOTO 350
          C
          C      EBENE 1 ,NAK=.TRUE.
905      C      330 XC=XZELL-AX2
          C      IF (NRANF .GE. 9999) NRANF=NRANF-9998
          C      IF (Y .LE. 0) GOTO 340
          C      Y>0
          C      STREUUNG AN NICKELATOM NI
910      C      YC=Y
          C      GOTO 350
          C
          C      Y<=0
          C      STREUUNG AN NICKELATOM NI
915      C      340 YC=AMOD(Y+AY05,AY)-AY2

```

```

350          MSTR=NI
          NATOM=NI
C
C
920 C  FESTLEGUNG DER THERMISCHEN AUSLENKUNG DES TARGETATOMS:
C  =====
C
C          IF (NAK) GOTO 370
C          NAK=.FALSE., D.H. EBENE 2
925 C          IF (Y .GE. -AY) GOTO 360
C          Y<-AY, D.H. BULK
C          XTHM=UBULK
C          YTHM=UBULK
C          GOTO 390
930 C          Y>-AY, D.H. OBERFLAECHE
360 C          XTHM=U2X
C          YTHM=U2Y
C          GOTO 390
C          NAK=.TRUE., D.H. EBENE 1
935 C          IF (Y .GE. -AY2) GOTO 380
C          Y<-AY2, D.H. BULK
C          XTHM=UBULK
C          YTHM=UBULK
C          GOTO 390
940 C          Y>-AY2, D.H. OBERFLAECHE
380 C          XTHM=U1X
C          YTHM=U1Y
390 C          XTH=XTHM*XRAN(NRANF)
C          YTH=YTHM*YRAN(NRANF)
945 C
C
C          BERECHNUNG DES STOSSPARAMETERS B DES PROJEKTILS ZU DEM
C          =====
C          THERMISCH AUSGELENKTEM TARGETATOM:
950 C          =====
C
C          XBC=XC-XTH
C          YBC=YC-YTH
C          B =SQRT(XBC*XBC+YBC*YBC)
955 C
C
C          BERECHNUNG DES ENERGIEVERLUSTES DES PROJEKTILS:
C          =====
960 C          DISKRETISIERUNG DER PROJEKTILENERGIE E:
C          NEN=INT(E*1.333E-4)+1
C          DER ENERGIEBEREICH VON 0. BIS 150000.EV WIRD IN
C          20 INTERVALLE EINGETEILT:
C          [      0.EV ...    7500.EV)   NEN= 1
965 C          [    7500.EV ...   15000.EV)   NEN= 2
C          [  142500.EV ...  150000.EV)   NEN=20
C
C          IF (B .GE. 2.00) GOTO 430
C          IF (NP15 .EQ. 0) GOTO 398
970 C          D.H. KEIN ENERGIEVERLUST
C          IF (NP15 .EQ. 1) GOTO 392
C          ENERGIEVERLUST ENERGIE- UND STOSSPARAMETERABHAENGIG NACH
C          OEN UND ROBINSON
C          E=E-ELOSS(NEN)*AK*EXP(-0.3*B*ATFIN(NI))
975 C          GOTO 398
C          ENERGIEVERLUST NACH ZIEGLER ,STOSSPARAMETERUNABHAENGIG, RANDOM-

```

```

C      RICHTUNG, SUMME UEBER ALLE TEILBEITRAEGE ZUM ENERGIEVERLUST)
392  E=E-ELOSS(NEN)
C
980  C
C      ABSCHNEIDEN DER IONISATIONSWAHRSCHEINLICHKEIT BEI BC:
C      =====
C
C      BC: ABSCHNEIDESTOSSPARAMETER
985 398  IF (B .GE. BC) GOTO 430
C
C      DISKRETISIERUNG DES STOSSPARAMETERS B:
C      NB=INT(B* 50.)+1
C
990  C
C      TIEFEN-Y- UND WINKEL-THETA-AUFGELOESTES AUGER-AUSBEUTEPROFIL:
C      =====
C
C      DISKRETISIERUNG DER TIEFE Y:
995  IF (Y .GE. 0.5*AY2 .OR. Y .LE. -99.5*AY2) GOTO 410
C      MY=INT((-Y+AY2*1.5)*AYIN2)
C      [ 1.5*AY2 ... 0.5*AY2) MY= 0
C      [ 0.5*AY2 ... - 0.5*AY2) MY= 1
C      [- 0.5*AY2 ... - 1.5*AY2) MY= 2
1000 C      [- 1.5*AY2 ... - 2.5*AY2) MY= 3
C      ...
C      [- 97.5*AY2 ... - 98.5*AY2) MY= 99
C      [- 98.5*AY2 ... - 99.5*AY2) MY=100
C      [- 99.5*AY2 ... -100.5*AY2) MY=101
1005 DO 400 NORBI=2,4
400  AEP(NT,NORBI,MY)=AEP(NT,NORBI,MY)+TABION(NEN,NB,NORBI)
410  CONTINUE
C
1010 C
C      INTEGRALES WINKEL-THETA-AUFGELOESTES AUGER-AUSBEUTEPROFIL:
C      =====
C
C      GEWICHTET MIT VERSCHIEDENEN AUSTRITTSWAHRSCHEINLICHKEITEN:
1015 DO 420 NPROF=NPROF1,NPROF2
C      AE(NPROF)=TABION(NEN,NB,NORBIT(NPROF))
C      ARG=Y*LAMINV(NPROF)
C      IN FORTRAN EXT. VERS.4 WIRD DIE EXPONENTIALFUNKTION
C      FUER ARGUMENTE -675.82 < ARG < 741.67 BERECHNET.
1020 IF (ARG .LT. -100.) ARG=-100.
C      AES(NPROF)=AES(NPROF)+AE(NPROF)*EXP(ARG)
420  CONTINUE
C
C
430  NРАНF=NРАНF+1
1025 NCOL(1)=NCOL(1)+1
C      IF (NP9 .EQ. 1 )
C      + WRITE (2,99985) NCOL(1),AUS(MSTR),
C      + X,Y,XC,YC,XZELL,XTH,YTH,B,PXR,PYR,E,ELOSS(NEN),
C      + AE(2),AE(6),AE(11),AES(2),AES(6),AES(11),NEN,NB,NATOM
1030 99985 FORMAT (1H ,I4,A5,2F7.2,3F6.2,3F5.2,2F7.2,F8.0,F5.1,2F7.4,
C      + F7.4,2F6.2,F7.2,I3,I3,I2)
C
C
C      BERECHNUNG DES STREUWINKELS DELTA
1035 C =====
C      SOWIE DER ORTS- UND IMPULSKOORDINATEN:
C      =====

```

```

C
1040 RHO=B*ATFIN(NATOM)
      IF (RHO .GE. 1.5) GOTO 440
      DB=1.01*FFE(NATOM)*EXP(-0.5*RHO)/(RHO*E*B)
      GOTO 450
440 DB=FFE(NATOM)*((0.03*ABS(RHO-3.8)+0.64)
+ *EXP(-0.3*RHO)/(RHO*E*B)
1045 C DELTA: STREUWINKEL DES PROJEKTILS IM LABORSYSTEM [GRAD]
450 C DELTA=DB*B
      PXR=PXR+DB*XBC
      PYR=PYR+DB*YBC
      X=X+AZRAD*PXR
1050 Y=Y+AZRAD*PYR
      C
      C
      C BERECHNUNG DES ELASTISCHEN ENERGIEUEBERTRAGS ET AUF DAS TARGETATOM:
      C =====
1055 C
      C ENERGIEUEBERTRAG ET IN [EV],
      C PROJEKTIENERGIE E IN [EV]
      C FUER KLEINE STREUWINKEL UND LEICHTE PROJEKILE GILT DIE NAEHERUNG
      C STREUWINKEL (SP-SYSTEM)=STREUWINKEL (LABOR-SYSTEM)=DELTA
1060 ET=E*AMENERG(NATOM)*(1.-COSD(DELTA))
      C
      C
      C BERECHNUNG DER STREUWINKEL DES RUECKSTOSSTARGETATOMS:
      C =====
1065 C
      C IF (NP11 .EQ. 0 .OR. ET .LT. 0.01 .OR. ET .GE. 1000.) GOTO 460
      C DBT=(180.-DELTA)/(2.0*B)
      C THETAT= PXR-DBT*XBC
      C PHIT = PYR-DBT*YBC
1070 C
      C
      C EINORDNUNG DER GESTREUTEN TARGETATOME IN EIN RASTER NACH
      C =====
      C TEICHENART (NATOM), ENERGIE (ET) UND STREUWINKEL (THETAT,PHIT):
1075 C =====
      C
      C IF (THETAT .LE. -180. .OR. THETAT .GE. 180.) GOTO 460
      C IF (PHIT .LT. 0. .OR. PHIT .GE. 90.) GOTO 460
1080 C
      C ENERGIERASTER
      C KET= 5
      C IF (ET .LT. 100.0) KET=4
      C IF (ET .LT. 10.0) KET=3
      C IF (ET .LT. 1.0) KET=2
1085 C IF (ET .LT. 0.1) KET=1
      C LOGARITHMISCHE RASTERUNG (1 INTERVALL PRO DEKADE):
      C 0.01 ... 0.09 EV KET=1
      C 0.1 ... 0.99 EV KET=2
      C 1.0 ... 9.99 EV KET=3
1090 C 10.0 ... 99.99 EV KET=4
      C 100.0 ... 999.99 EV KET=5
      C
      C
      C WINKEL-THETAT-RASTER. LINEARE TEILUNG 360 GRAD IN 8 TEILE.
      C KTHETAT= INT((THETAT+180.)*0.022222)+1
1095 C [-180 ... -135) KTHETAT=1
      C [-135 ... - 90) KTHETAT=2
      C [- 90 ... - 45) KTHETAT=3
      C [- 45 ... 0) KTHETAT=4

```

```

1100 C      [  0 ... 45)    KTHETAT=5
      C      [ 45 ... 90)    KTHETAT=6
      C      [ 90 ... 135)   KTHETAT=7
      C      [ 135 ... 180)  KTHETAT=8
      C
      C      WINKEL-PHIT-RASTER. DIE EINTEILUNG IST SO GEWICHTET, DASS
1105 C      DIE THETAT-PHIT-INTERVALLE AUF DER EINHEITSKUGEL GLEICHE
      C      RAUMWINKEL BEDECKEN.
      C      KPHIT= INT(SIND(PHIT)*4.)+1
      C      [-90.00 ... -48.59) GRAD    KPHIT=
      C      [-48.59 ... -30.00) GRAD    KPHIT=
1110 C      [-30.00 ... -14.48) GRAD    KPHIT=
      C      [-14.48 ... 0.00) GRAD      KPHIT=
      C      [ 0.0 ... 14.48) GRAD      KPHIT=1
      C      [ 14.48 ... 30.00) GRAD    KPHIT=2
      C      [ 30.00 ... 48.59) GRAD    KPHIT=3
1115 C      [ 48.59 ... 90.00) GRAD    KPHIT=4
      C      NTARGNI (KET,KTHETAT,KPHIT)=NTARGNI (KET,KTHETAT,KPHIT)+1
      C
      C
      C      EINORDNUNG DER GESTREUTEN TARGETATOME IN EIN RASTER NACH
1120 C      =====
      C      TEICHENART (NATOM), ENERGIE (ET) UND TIEFE (Y):
      C      =====
      C
460  IF (NP10 .EQ. 0) GOTO 520
1125 C      DISKRETISIERUNG DER TIEFE Y:
      C      NNY=INT(100.-Y*AYIN1)-97
      C      IF (NNY .LT. 1) GOTO 470
      C      IF (NNY .GT. 23) GOTO 480
      C      GOTO 490
1130 C      EINORDNUNG IN LINEARES TIEFENRASTER:
      C      +AY < Y < +UNENDLICH    NNY = 1
      C      0 < Y < +AY              NNY = 2
      C      -AY < Y < 0              NNY = 3
      C      -2AY < Y < -AY           NNY = 4
1135 C      ...
      C      -20AY < Y < -19AY        NNY = 22
      C      -UNENDLICH < Y < -20AY    NNY = 23
470  NNY=1
      C      GOTO 490
1140 480 NNY=23
      C
      C      DISKRETISIERUNG DES ENERGIEUEBERTRAGS ET:
490  IF (ET .LT. 1E-6) GOTO 500
      C      KET=INT(20.*ALOG10(ET*1E+6))+2
1145 C      EINORDNUNG IN LOGARITHMISCHES ENERGIERASTER
      C      [ 0.0000 ... .00000112) EV    KET=1
      C      [ 0.0112 ... .0000013 ) EV    KET=2
      C      [ 0.013 ... .0000014 ) EV    KET=3
      C      [ .... )
1150 C      [ .... )
      C      [39810.717 ... 44668.359 ) EV    KET=213
      C      [44668.359 ... 50118.723 ) EV    KET=214
      C      [50118.723 ... 56234.132 ) EV    KET=215
      C
1155 IF (KET .GT. 215) GOTO 520
      C      GOTO 510
500 KET=1
510 LET(KET,NNY)=LET(KET,NNY)+1
      C      LET(KET,NNY) : VERTEILUNG DER ENERGIEUEBERTRAEGE

```

```

1160 C      VON 0.000001 BIS 50119 EV IN LOGARITHMISCHER RASTERUNG
      C      (20 TEILE PRO DEKADE)
      C
      C
      C      ERMITTLUNG DES GESAMTENERGIEUEBERTRAGS AUF NICKEL- BZW.
1165 C      SAUERSTOFFATOME:
      C      ETARG(NATOM)=ETARG(NATOM)+ET
      C
      C
      C      BESTIMMUNG DER EINDRINGTIEFE DES PROJEKTILS YPEN:
1170 C      =====
      C
      C      520 IF (Y .LT. YPEN) YPEN=Y
      C
      C
      C      EINORDNUNG IN DAS FLUSSDICHTERASTER:
1175 C      =====
      C
      C      EINORDNUNG IN DAS FEINE (K*L)-FLUSSDICHTERASTER:
      C      IF (Y .GE. OGY .OR. Y .LE. UGY) GOTO 530
1180 C      IFL=INT(AMOD(X+AX0025,AX)*AXIN20)+1
      C      JFL=INT(21.5-AYIN20*Y)
      C      F(IFL,JFL)=F(IFL,JFL)+1.
      C      FF(JFL)=FF(JFL)+1.
      C      EE(JFL)=EE(JFL)+E
1185 C      EINORDNUNG IN GROEBERE FLUSSDICHTEVERTEILUNG FUER GRAPHIK:
      C      (M/2*N/2 RASTER)
      C      IF(NP7.EQ.0 .OR. Y.GE.UGYV .OR. Y.LE.UGYV) GOTO 530
      C      IFL=INT(AMOD(X+AX0050,AX)*AXIN10)+1
      C      JFL=INT(11.5-AYIN10*Y)
1190 C      ZF(IFL,JFL)=ZF(IFL,JFL)+1.
      C
      C
      C      ABRUCHBEDINGUNGEN FUER TRAJEKTORIENENDE:
      C      =====
1195 C
      C      530 IF (NCOL(1) .GT. NCOLMAX .OR.
      C          + E .LE. EMIN .OR.
      C          + ABS(PXR).GE. PXRMAX .OR.
      C          + ABS(PYR).GE. PYRMAX .OR.
1200 C          + Y .GE. YMAX .OR.
      C          + Y .LE. YMIN ) GOTO 610
      C
      C
      C      TRANSFORMATION FUER STUFEN:
1205 C      =====
      C
      C      IF (NP3 .EQ.0 ) GOTO 310
      C      IF (KK .GE. NK ) GOTO 540
      C      KK=KK+1
1210 C      GOTO 310
      C      540 GOTO (560,570,550,590,600,580),NP3
      C
      C      1/2 STUFEN AUF- UND ABWAERTS:
      C      550 KK=1
1215 C      AUF=.NOT.AUF
      C      IF (AUF) GOTO 560
      C      GOTO 570
      C
      C      1/2 STUFEN AUFWAERTS:
1220 C      560 X=X-AX2

```

```

      Y=Y-AY2
      NAK=.NOT.NAK
      KK=1
      GOTO 310
1225  C
      C      1/2 STUFEN ABWAERTS:
570   X=X+AX2
      Y=Y+AY2
      NAK=.NOT.NAK
1230  KK=1
      GOTO 310

      C
      C      1/1 STUFEN AUF- UND ABWAERTS:
580   KK=1
1235  AUF=.NOT.AUF
      IF (AUF) GOTO 590
      GOTO 600

      C
      C      1/1 STUFEN AUFWAERTS:
1240 590 Y=Y-AY
      KK=1
      GOTO 310

      C
      C      1/1 STUFEN ABWAERTS:
1245 600 Y=Y+AY
      KK=1
      GOTO 310

      C
      C      ENDE DER BEHANDLUNG EINES BINAEREN STOSSES:
1250  C =====
      C
      C
      C
      C
      C
1255 610 NCOL(2)=NCOL(2)+NCOL(1)
      C
      C
      C      VERTEILUNG DER EINDRINGTIEFEN YPEN ALLER PROJEKILE:
      C =====
1260  C
      C      LT1 = INT(-YPEN*AYIN2+100.)-98
      C      IF (LT1 .LE. 1) LT1 = 1
      C      IF (LT1 .GT. 10) LT1 = 11
      C      NT1(LT1) = NT1(LT1) + 1
1265  C
      C      LT10 = INT(-YPEN*0.1*AYIN2+100.)-99
      C      IF (LT10 .LE. 1) LT10 = 1
      C      IF (LT10 .GT. 10) LT10 = 11
      C      NT10(LT10) = NT10(LT10) + 1
1270  C
      C
      C      VERTEILUNG DER ABBRUCHKRITERIEN:
      C =====
1275  C
      C      IF (Y      .GE. YMAX ) GOTO 620
      C      IF (Y      .LE. YMIN ) GOTO 630
      C      IF (ABS(PXR) .GE. PXRMAX ) GOTO 640
      C      IF (ABS(PYR) .GE. PYRMAX ) GOTO 650
      C      IF (E      .LE. EMIN ) GOTO 660
1280  C      IF (NCOL(1) .GT. NCOLMAX) GOTO 670
      C
620  NRUECK=NRUECK+1

```

```

C
C      ENERGIEVERTEILUNG DER RUECKGESTREUTEN PROJEKILE :
1285      NENER(NEN)=NENER(NEN)+1
          ENDE=1
          GOTO 680
1300      630      ENDE=2
          NTIEFE=NTIEFE+1
          GOTO 680
1290      640      NPXR=NPXR+1
          ENDE=3
          GOTO 680
1295      650      NPYR=NPYR+1
          ENDE=4
          GOTO 680
1300      660      NENERG=NENERG+1
          ENDE=5
          GOTO 680
1300      670      ENDE=6
          C
          C
1305      680      IF (NP9 .EQ. 1) WRITE (2,99987)
          IF (NP8 .EQ. 1 .OR. NP9 .EQ. 1) WRITE (2,99984)
          + IZ, JZ, XANF, PXR, PYR, SQRT(PXR*PXR+PYR*PYR), E,
          + NCOL(1), YPEN, Y, AUSEND(ENDE),
          + AES(1), AES(3), AES(8), AES(11)
1305      99984      FORMAT(1H ,2I3,F7.3,3F7.2,F8.0,I7,2F8.2,A7,4(1E12.3))
          C
          C      UEBERTRAGEN DER AUGER-ELEKTRONENAUSBEUTEN:
1310      AFA(IZ,JZ)=AES(NPROF1)
          DO 690 NPROF=NPROF1,NPROF2
1315      690      FA(NT,NPROF)=FA(NT,NPROF)+AES(NPROF)
          700      CONTINUE
          710      CONTINUE
          C
          C      ENDE DER SCHLEIFE ZUM VARIIEREN DER EINSCHUSSKOORDINATEN XANF,YANF:
          C      =====
          C
          C
          C
1320      C      PROGRAMM-LAUFZEITMESSUNG
          TIME2=SECOND(V)-TIME2
          NCOL(3)=NCOL(3)+NCOL(2)
          C
          C      AUSDRUCK DER VERTEILUNG DER ABRUCHKRITERIEN:
1325      WRITE(2,99983) NRUECK, NTIEFE, NPXR, NPYR, NENERG
          99983      FORMAT(1H0,* NRUECK =*,I8,* NTIEFE =*,I8,*      NPXR =*,I8,
          + *      NPYR =*,I8,*      NENERG=*,I8/1H0)
          C      AUSDRUCK DER VERTEILUNG DER ENERGIE DER RUECKGESTREUTEN
          C      PROJEKILE:
1330      WRITE(2,99982) (I,I=1,20),NENER
          99982      FORMAT(* ENERGIEVERTEILUNG DER RUECKGESTREUTEN PROJEKILE:*/
          + * KANAL-NR:*,20I5/* ANZAHL      :*,20I5/1H0)
          C
          C      AUSDRUCK DER EINDRINGTIEFEN DER PROJEKILE YPEN:
1335      WRITE(2,99981) NT1
          99981      FORMAT(* VERTEILUNG DER EINDRINGTIEFEN ALLER PROJEKILE*/
          + * REFL.EBENE      :*,
          + *      1      2      3      4      5*,
          + *      6      7      8      9      10 TIEFER*/
1340      + * ANZAHL      :*,10I6,I8/1H0)
          WRITE(2,99980) NT10
          99980      FORMAT(* REFL.EBENE      :*,

```

```

+ *      10      20      30      40      50*,
+ *      60      70      80      90     100  TIEFER*/
1345 + * ANZAHL      :*,10I6,I8/1H0)
C
C      TIEFENABHAENGIGKEIT DES IONENFLUSSES UND DER MITTLEREN ENERGIE:
DO 715 JFL=JFLANF,JPLEND
715 EE(JFL)=EE(JFL)/FF(JFL)
1350 WRITE (2,99967) (I,I=1,10), FF, (I,I=1,10), EE
99967 FORMAT (1H ///* TIEFENABHAENGIGKEIT DES IONENFLUSSES*//1H ,
+ 10I12/1H ,10(10F12.0/1H ),2F12.0//1H ,
+ * TIEFENABHAENGIGKEIT DER MITTLEREN PROJEKTIENERGIE*//1H ,
+ 10I12/1H ,10(10F12.0/1H ),2F12.0//1H )
1355 C
C
C      NORMIEREN DER FLUSSDICHTEN:
C      =====
C
C
1360 C      NORMIERUNGSFAKTOR FNORM:
C      M EINSCHUSS-RASTERZELLEN, K REGISTRATUR-RASTERZELLEN PRO AX
C      N EINSCHUSS-RASTERZELLEN, L REGISTRATUR-RASTERZELLEN PRO AY
C      FNORM=AZ*TAND(PHI)*K*L/(2*AY*COSD(THETA(NT)))*M*N)
DO 730 JFL=JFLANF,JPLEND
1365 DO 720 IFL=1,20
720 F(IFL,JFL)=F(IFL,JFL)*FNORM
730 CONTINUE
IF (NP6 .EQ. 0) GOTO 740
C
C
1370 C      AUSDRUCK DER FLUSSDICHTEMATRIX:
C      WRITE (2,99979)
99979 FORMAT (1H0,*FLUSSVERTEILUNG :*/1H )
WRITE (2,99978) (IFL,IFL=1,20),(JFL,(F(IFL,JFL),
1375 + IFL=1,20),JFL,JFL=JFLANF,JPLEND),(IFL,IFL=1,20)
99978 FORMAT (1H ,6X,20(I4,2X)/1H0,102(I3,3X,20F6.2,3X,I3/1H )/
+ 1H ,6X,20(I4,2X))
C
C
1380 C      BESTIMMUNG DER AUGER-ELEKTRONENAUSBEUTE AUS DEN FLUSSDICHTEN
C      =====
C      AM ATOMORT:
C      =====
C
1385 C      MITTELUNG UEBER 9 FLUSSDICHTERASTERZELLEN PRO ATOMORT.
C      ALLE FLUSSMATRIXELEMENTE ZAEHLEN GLEICH STARK:
740 G1=1.11111
G2=1.11111
C      FLUSSDICHTEN AM ORT DER SAUERSTOFFATOME:
1390 FA(NT,16)=0.
C      FLUSSDICHTEN AM ORT DER REKONSTRUIERTEN NICKELATOME:
FA(NT,17)=0.
DO 750 I=1,8,2
1395 + FA(NT,I+17)=G1*(F(10,10*I+10)+F(11,10*I+10)+F(12,10*I+10)+
+ F(10,10*I+11)+ F(12,10*I+11)+
+ F(10,10*I+12)+F(11,10*I+12)+F(12,10*I+12))
+ G2*F(11,10*I+11)
750 + FA(NT,I+18)=G1*(F(20,10*I+20)+F( 1,10*I+20)+F( 2,10*I+20)+
+ F(20,10*I+21)+ F( 2,10*I+21)+
1400 + F(20,10*I+22)+F( 1,10*I+22)+F( 2,10*I+22))
+ G2*F( 1,10*I+21)
C
C      AUGER-ELEKTRONENAUSBEUTEN AUS DER FLUSSDICHTEN AM ATOMORT,

```

```

C      JEDOCH GEWICHTET MIT DER AUSTRITTSWAHRSCHEINLICHKEIT
1405 C      VON DER REK. LAGE BIS ZUR 8. LAGE:
      DO 770 NPROF=13,15
      FA(NT,NPROF)=FA(NT,17)
      DO 760 I=18,25
      FA(NT,NPROF)=FA(NT,NPROF)+FA(NT,I)*EXP((I-17)*AY2*LAMINV(NPROF))
1410 760 CONTINUE
      770 CONTINUE
      C
      C
      C      AUSDRUCK VON AUGER-ELEKTRONENAUSBEUTEN FUER DEN EINSCHUSSWINKEL
1415 C      THETA(NT):
      IF (NP4 .EQ. 0 .OR. N*M .GT. 10) WRITE (2,99977) THETA(NT),
      + ((AUSG(I,J),I=1,2),LAMBDA(J),FA(NT,J),J=1,25),
      + NCOL(2),TIME2,TIME2/NCOL(2)
      99977 FORMAT (1H0/* ELEKTRONENAUSBEUTE BZW FLUSSDICHTE AM*,
1420      + * ATOMORT FUER THETA=*,F5.2/1H ,
      + 25(2A10,* LAMBDA=*,F5.1,*A*,F15.5/1H ),
      + * NCOL(THETA)=*,I15,* TIME2=*,F12.3,* SEC*,
      + * ZEIT PRO STOSS =*,F12.8,* SEC*/1H0)
      C
      C
1425 C      AUFRUF DER GRAPHIKAUSGABE DER FLUSSDICHTEVERTEILUNG:
      C      =====
      C
      IF (NP7 .EQ. 1) CALL GRAFLU (THETA(NT))
1430 C
      C
      C      AUSDRUCK DER VERTEILUNG DER ENERGIEUEBERTRAEGE
      C      (TIEFEN-Y-AUFGELOEST):
      IF (NP10 .EQ. 0) GOTO 780
1435      DD=10.**0.05
      DO 778 KET=1,215
      FET(KET)=1E-100
      DO 774 NNY=1,23
      FET(KET)=FET(KET)+LET(KET,NNY)
1440 774 CONTINUE
      FET(KET)=FET(KET)/(1E-6*(DD**KET-DD**(KET-1)))
      778 CONTINUE
      WRITE (2,99976)
      99976 FORMAT (1H0,*ENERGIEUEBERTRAG AUF NICKELATOME*/1H ,
1445      + *ENERGIE SUMME Y>0.0 -2.5 -5.0 -7.5-10.0-12.5-15.0*,
      + *-17.5-20.0-22.5-25.0-27.5-30.0-32.5-35.-37.-40.-42.-45.-47.*,
      + *-50. Y<-50.0*)
      WRITE (2,99975) (DD**(KET-1)*1E-6,(LET(KET,NNY),NNY=1,23),
      + KET=1,215), NCOL(3), ETARG(OX),ETARG(NI)
1450 99975 FORMAT (1H0,215(E9.3,I2,4I7,3I6,14I5,I5/1H ),*NCOLOX=*,8X,
      + 2X,*NCOLNI=*,8X,2X,*NCOLOX1=*,8X,2X,*NCOL(3)=*,I14,2X,
      + *ETARG(OX)=*,F12.2,2X,*ETARG(NI)=*,F12.2/1H0)
      WRITE (2,99966) (KET, DD**(KET-1)*1E-6,
      + DD**KET*1E-6, FET(KET), 20*ALOG10(FET(KET))), KET=1,215)
1455 99966 FORMAT (1H0,* ANZAHL DER ENERGIEUEBERTRAEGE PRO [EV] MIT*,
      + * EINEM ENERGIEUEBERTRAG ZWISCHEN DEN ANGEGBENEN GRENZEN:*/1H ,
      + 215(* KET=*,I4,4X,*ET VON*,F14.7,*EV BIS*,F14.7,*EV *,
      + E20.6,* UEBERTRAEGE/EV*,F15.2/1H ))
      C
1460 C      AUSDRUCK DER VERTEILUNG DER ENERGIEUEBERTRAEGE
      C      (WINKEL-THETAT- UND WINKEL-PHIT-AUFGELOEST):
      780 IF (NP11 .EQ. 1) WRITE (2,99974)
      + (KET,(KTHETAT,KTHETAT=1,8),
      + (KPHIT,(NTARGNI(KET,KTHETAT,KPHIT),KTHETAT=1,8),KPHIT=1,4),

```

```

1465      + KET=1,5)
99974  FORMAT (1H0,*STREUVERTEILUNG DER NICKELATOME*/1H ,
      + 5(*KET=*,I3/1H ,10X,8I10/1H ,4(9I10/1H )/1H0))
C
      IF (NP14 .NE. 1) GOTO 790
1470  C   AUSDRUCK DER AUGER-ELEKTRONENAUSBEUTE DER EINZELNEN TRAJEKTORIEN
C   ZUR ANALYSE DES STATISTISCHEN FEHLERS DER AUGER-ELEKTRONEN-
C   AUSBEUTE FUER DEN WINKEL THETA(NT).
C   DIESE DATEN WERDEN IM PROGRAMM FEHLAN WEITERVERARBEITET.
C   WRITE (2,99965) (J,(AFA(I,J),I= 1, 16),J=1, 20),
1475  C   + (J,(AFA(I,J),I= 17, 32),J=1, 20)
C   + (J,(AFA(I,J),I= 33, 48),J=1,160),
C   + (J,(AFA(I,J),I= 49, 64),J=1,160),
C   + (J,(AFA(I,J),I= 65, 80),J=1,160),
C   + (J,(AFA(I,J),I= 81, 96),J=1,160),
1480  C   + (J,(AFA(I,J),I= 97,112),J=1,160),
C   + (J,(AFA(I,J),I=113,128),J=1,160),
C   + (J,(AFA(I,J),I=129,144),J=1,160),
C   + (J,(AFA(I,J),I=145,160),J=1,160)
C99965  FORMAT (1H //((( ( 40(1H ,I3,1X,16E8.2)/)))
1485  WRITE (6) M, N, AFA
790    CONTINUE
C
C   ENDE DER SCHLEIFE ZUM VARIIEREN DES EINSCHUSSWINKELS THETA(NT):
C   =====
1490  C
C
C   AUSLESEN DER TIEFEN-Y-AUFGELOESTEN AUSBEUTEPROFILE
C   AEP(NT,NORBI,MY):
      IF (NP12 .EQ. 1 .AND. NP13 .EQ. 1) WRITE (4)
1495  + ((AEP(I,J,K),I=1,14),J=1,4),K=1,100)
      IF (NP12 .EQ. 2 .AND. NP13 .EQ. 1) WRITE (5)
      + ((AEP(I,J,K),I=1,35),J=1,4),K=1,100)
C
C   AUSDRUCK DER AUSBEUTEPROFILE:
1500  IF (NP4 .EQ. 1 .AND. NP12 .EQ. 2) WRITE (2,99970)
      +(THETA(NT),NT=1,7),
      +((AUSG(I,J),I=1,2),LAMBDA(J), (FA(NT,J),NT= 1, 7),J=1,25),
      +(THETA(NT),NT=8,14),
      +((AUSG(I,J),I=1,2),LAMBDA(J), (FA(NT,J),NT= 8,14),J=1,25),
1505  +(THETA(NT),NT=15,21),
      +((AUSG(I,J),I=1,2),LAMBDA(J), (FA(NT,J),NT=15,21),J=1,25),
      +(THETA(NT),NT=22,28),
      +((AUSG(I,J),I=1,2),LAMBDA(J), (FA(NT,J),NT=22,28),J=1,25),
      +(THETA(NT),NT=29,35),
1510  +((AUSG(I,J),I=1,2),LAMBDA(J), (FA(NT,J),NT=29,35),J=1,25)
99970  FORMAT (1H0//(* ELEKTRONENAUSBEUTE BZW FLUSSDICHTE AM *,
      + *ATOMORT IN ABHAENGIGKEIT VOM WINKEL THETA:*/1H ,
      + 5(*ATOM, LINIE*,4X,*-*,5X,*THETA*,11X,7(5X,F5.2,3X)/1H ,
      + 25(2A10,* LAMBDA=*,F5.1,*A*,7(F13.5)/1H )/1H0))
1515  IF (NP4 .EQ. 1 .AND. NP12 .EQ. 1) WRITE (2,99969)
      +(THETA(NT),NT=1,7),
      +((AUSG(I,J),I=1,2),LAMBDA(J), (FA(NT,J),NT= 1, 7),J=1,25),
      +(THETA(NT),NT=8,14),
      +((AUSG(I,J),I=1,2),LAMBDA(J), (FA(NT,J),NT= 8,14),J=1,25)
1520  99969  FORMAT (1H0//(* ELEKTRONENAUSBEUTE BZW FLUSSDICHTE AM *,
      + *ATOMORT IN ABHAENGIGKEIT VOM WINKEL THETA:*/1H ,
      + 2(*ATOM, LINIE*,4X,*-*,5X,*THETA*,11X,7(5X,F5.2,3X)/1H ,
      + 25(2A10,* LAMBDA=*,F5.1,*A*,7(F13.5)/1H )/1H0))
C
1525  C

```

```
C  AUFRUF DER GRAPHIKAUSGABE DER AUGER-AUSBEUTEPROFILE:
C  =====
C
1530 C      IF (NP5 .EQ. 1 .AND. NP4 .EQ. 1) CALL GRACHA
C
C      PROGRAMM-LAUFZEITMESSUNG:
C      TIME1=SECOND(V)-TIME1
C      WRITE(2,99968)TIME1,NCOL(3),TIME1/NCOL(3)
99968 FORMAT(1H0,*RECHENZEIT MIT NEBENZEIT:*,F10.3,* SEC*,2X,
1535 + * GESAMTZAHL DER STOESSE :*,I12,2X,
+ * ZEIT PRO STOSS (INCL. NEBENZEIT):*,F10.8,* SEC*)
C      STOP
C      END
```



```
WRITE (67,99997) T,PHI,NSTUF(NP3+1),NK
CALL MOVE TO (5.,15.)
WRITE (67,99996) DATE(V),1./FANORM
65 CALL WINDOW (25,185,68.5,268.5)
CALL USCALE (-8.*NP12,8.*NP12,0.,0.,2.0,0.)
CALL AXIS (25.,68.5,"THETA",-5,160.,0.,-8.*NP12,0.1*NP12)
CALL AXIS (25.,68.5,"AUSBEUTE",8,200.,90.,0.,0.01)
CALL CURVEX (1,NTE*2,X,Y,"LINEAR",164,1)
70 30 CONTINUE
99999 FORMAT (1H,2A10,* LAMBDA=*,F5.1,*A*)
99998 FORMAT (*[001]*)
99997 FORMAT (14X,*T=*,F5.0,*K*,2X,*PHI=*,F3.1,
+ 2X,A5,* ST NK=*,I4)
75 99996 FORMAT (A10,3X,*FANORM=*,F9.2)
RETURN
END
```

```

C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C SUBROUTINE GRAFLU (THETA)
C
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C   BESCHREIBUNG:
C   =====
C
C DIE ROUTINE GRAFLU DIENST DER GRAPHISCHEN AUSGABE DER FLUSSDICHT-
C VERTEILUNG ZF(X,Y) IM OBERFLAECHENNAHEN BEREICH. FUER THETA=0
C WIRD DIE FLUSSDICHTEVERTEILUNG SYMMETRISIERT.
C DIE NICKELKETTEN WERDEN DURCH KLEINE VIERECKE, DIE SAUERSTOFFKETTEN
C DURCH KLEINE DREIECKE MARKIERT.
C
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C   BESCHREIBUNG DER VARIABLEN:
C   =====
C
C A      REAL    LINKE X-KOORD. DES FENSTERS REL. Z. LI. BLATTR.
C B      REAL    RECHTE X-KOORD. DES FENSTERS REL. Z. LI. BLATTR.
C C      REAL    UNTERE Y-KOORD. DES FENSTERS REL. Z. UN. BLATTR.
C D      REAL    OBERE Y-KOORD. DES FENSTERS REL. Z. UN. BLATTR.
C FNORM   REAL    NORMIERUNGSFAKTOR FUER FEINE FLUSSDICHT-
C                VERTEILUNG. DIE FLUSSDICHTE WIRD AUF DIE EIN-
C                FALLLENDE FLUSSDICHTEN NORMIERT.
C
C THETA   REAL    LATERALER EINSCHUSSWINKEL THETA
C V       REAL    DUMMY-VARIABLE
C X       REAL    X-KOORDINATE DER FLUSSDICHTEN ZF(X,Y);
C          BEZEICHNUNG WIE IM HAUPTPROGRAMM NI001
C
C Y       REAL    Y-KOORDINATE DER FLUSSDICHTEN ZF(X,Y);
C          BEZEICHNUNG WIE IM HAUPTPROGRAMM NI001
C
C ZF      REAL    GROEBERE FLUSSDICHTEN ZF(X,Y)
C ALLE UEBRIGEN VARIABLEN SIND BEREITS IM HAUPTPROGRAMM NI001
C BESCHRIEBEN
C
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C DIMENSION X(21),Y(26),Z(21,26,4)
C COMMON /GFL/ ZF(10,26), FNORM
C COMMON /ALL/ AX, AX2, AY, AY2, H, T, PHI, NK, NSTUF(7), NP3
C DO 10 I=1,21
C   X(I)=(I-1)*AX*0.1
C   DO 20 J=1,26
C     Y(J)=(J-16)*AY*0.1
C     IF (THETA .NE. 0.) GOTO 50
C     SYMMETRISIERUNG FUER THETA=0
C     DO 40 J=1,26
C       DO 30 I=2,10
C         Z(I,J,1)=(ZF(I,27-J)+ZF(12-I,27-J))*0.125*FNORM
C       Z(I+10,J,1)=Z(I,J,1)
C       Z(1,J,1)=ZF(1,27-J)*0.25*FNORM
C       Z(11,J,1)=Z(1,J,1)
C       Z(21,J,1)=Z(1,J,1)
C     GOTO 80
C   DO 70 J=1,26

```

```

DO 60 I=1,10
Z(I,J,1)=ZF(I,27-J)*0.25*FNORM
60  Z(I+10,J,1)=Z(I,J,1)
70  Z(21,J,1)=Z(1,J,1)
80  CONTINUE
      WRITE (2,99999) (I,I=1,20),(J,(Z(I,27-J,1),I=1,20),
+ J,J=1,26),(I,I=1,20)
      CALL BICUB (21,26,21,26,X,Y,Z,3300,IER)
70  IF (IER .NE. 0) STOP "FALSCHER PARAMETER IN BICUB"
      A= 34.
      B= 176.
      C= 40.
      D= 216.
75  C  FUER DIE SIMULATION          WURDE A= 5 B=205 C=37 D=287 GEWAEGHLT
  C  FUER DIE VEROEFFENTLICHUNG WURDE A=34 B=176 C=40 D=216 GEWAEGHLT
      CALL SHEET90 (1,210,297)
      CALL FRAME
      CALL MOVETO (5.,25.)
80  CALL SIZE (4)
      WRITE (67,99998) THETA
      CALL MOVETO (5.,15.)
      WRITE (67,99997) T,PHI,NSTUF(NP3+1),NK
      CALL MOVETO (5.,5.)
85  WRITE (67,99996) DATE(V)
      CALL WINDOW (A,B,C,D)
      CALL FRAME
      CALL USCALE (X(1)-0.001,X(21)+0.001,0.,Y(1)-0.001,
+ Y(26)+0.001,0.)
90  CALL MOVETO (0.,-AY2)
      CALL MARK (141)
      CALL MOVETO (0.,-3.*AY2)
      CALL MARK (141)
      CALL MOVETO (AX2,-2.*AY2)
95  CALL MARK (141)
      CALL MOVETO (AX2,0.)
      CALL MARK (141)
      CALL MOVETO (AX,-AY2)
      CALL MARK (141)
100 CALL MOVETO (AX,-3.*AY2)
      CALL MARK (141)
      CALL MOVETO (3.*AX2,-AY)
      CALL MARK (141)
      CALL MOVETO (3.*AX2,0.)
105 CALL MARK (141)
      CALL MOVETO (2.*AX,-AY2)
      CALL MARK (141)
      CALL MOVETO (2.*AX,-3.*AY2)
      CALL MARK (141)
110 DO 90 I=1,17
      CALL LINTYP (3,"-VOLLSTRICH")
      IF (MOD(I,5) .EQ. 0) CALL LINTYP (3,"- STRICHLIERT")
      CALL BICONT(21,26,21,4,26,4,X,Y,Z,FLOAT(I),IER)
90  IF (IER .NE. 0) STOP "FALSCHER PARAMETER IN BICONT"
115 99999 FORMAT (1H0.6X,20(14,2X)/1H0,26(13,3X,20F6.2,3X,13/1H )/
+ /X,20(14,2X))
99998 FORMAT (* FLUSSDICHTEVERTEILUNG IN [001] THETA=*,F5.2)
99997 FORMAT (14X,*T=*,F5.0,*K*,2X,*PHI=*,
+ F3.1,2X,A5,* ST NK=*,14)
120 99996 FORMAT (A10)
      RETURN
      END

```

9. Literaturverzeichnis

- [1] G. Petzow, Metallographisches Ätzen. Materialkundlich Technische Reihe 1 (Verlag Borntraeger, Berlin, 1976) S.11
- [2] H. Schnitzer, Praktikumsarbeit, Universität München, 1979
- [3] H. Metzger, Dissertation, Technische Universität München, 1974
- [4] M. Schuster, Diplomarbeit, Universität München, 1981
- [5] R. Sizmann und C. Varelas, Festkörperprobleme 17 (1977) 261
- [6] D.S. Gemmell, Rev. Mod. Phys. 46 (1974) 129
- [7] R. Weismann und K. Müller, Surface Sci. Reports 105 (1981) 251
- [8] N. Kobayashi, T. Irie, N. Maeda, H. Kojima, S. Akanuma und M. Sakisaka, J. Phys. Soc. Japan 47 (1979) 234
- [9] B.W. Holland, L. McDonnell und D.P. Woodruff, Solid State Communications 11 (1972) 991
- [10] H.Z. Sar-El, Rev. Sci. Instr. 38 (1967) 1210
- [11] Varian, Auger Cylindrical Mirror Spectrometer System Instruction Manual 87-400-261, 1972
- [12] V.V. Zashkvara, M.I. Korsunskii und O.S. Kosmachev, Sov. Phys. Tech. Phys. 11 (1966) 96
- [13] S. Aksela, Rev. Sci. Instr. 43 (1972) 1350
- [14] V.V. Zashkvara, M.I. Korunskii, V.P. Lavrov und V.S. Red'kin, Sov. Phys. Tech. Phys. 16 (1971) 141
- [15] S. Aksela, M. Karras, M. Pessa und E. Souninen, Rev. Sci. Instr. 41 (1970) 351
- [16] J.E. Draper und Cheng-yi Lee, Rev. Sci. Instr. 48 (1977) 852
- [17] C.F. Eagen und E.N. Sickafus, Rev. Sci. Instr. 48 (1977) 1269
- [18] C.C. Chang, Surface Sci. 25 (1971) 53
- [19] D.A. Bell, Electrical Noise - Fundamentals and Physical Mechanism (Academic Press, London, 1960)

- [20] D. Chattarji, The Theory of Auger Transitions (Academic Press, London, 1976)
- [21] R. Sizmann und C. Varelas, Nucl. Instr. and Meth. 132 (1976) 633
- [22] J. Lindhard, Mat.-Fys. Medd. Kgl. Danske Vid. Selsk. 34 Nr. 14 (1965)
- [23] C. Varelas und R. Sizmann, Radiation Effects 16 (1972) 211
- [24] H.B. Michaelson, Journal of Applied Physics 48 (1977) 4729
- [25] Don H. Madison und E. Merzbacher, Theory of Charged-Particle Excitation, in: Atomic Inner-Shell Processes, Ed.: B. Crasemann (Academic Press, New York, 1975)
- [26] W. Brandt, Proc. 5th Int. Conf. on Atomic Collisions in Solids, Gatlinburg, 1973, Ed.: S. Datz, B.R. Appleton, C.D. Maak (Plenum Press, New York, 1975) Bd. 1, S. 261
- [27] G.S. Khandelwal, B.H. Choi und E. Merzbacher, Atomic Data 1 (1969) 103
- [28] B.H. Choi, E. Merzbacher und G.S. Khandelwal, Atomic Data 5 (1973) 291
- [29] P. Richard, Ion-Atom Collisions, in: Atomic Inner-Shell Processes, Ed.: B. Crasemann (Academic Press, New York, 1975)
- [30] J.D. Garcia, R.J. Fortner und T.M. Kavanagh, Rev. Mod. Phys. 45 (1973) 111
- [31] J.D. Garcia, Phys. Rev. A1 (1970) 280
- [32] J.D. Garcia, Phys. Rev. A4 (1971) 955
- [33] J. Bang und J.M. Hansteen, Mat.-Fys. Medd. Kgl. Danske Vid. Selsk. 31 Nr. 13 (1959)
- [34] J.M. Hansteen und O.P. Mosebekk, Z. Phys. 234 (1970) 281
- [35] J.M. Hansteen und O.P. Mosebekk, Nucl. Phys. A201 (1973) 541
- [36] J.M. Hansteen, O.M. Johnsen und L. Kochbach, At. Data Tables 15 (1975) 305
- [37] V.U. Kitov und E.S. Parilis, Surface Sci. 138 (1984) 203
- [38] E. Parilis und L.M. Kishinevskii, Sov. Phys. Sol. State 3 (1960) 885

- [39] L.M. Kishinevskii und E.S. Parilis, Bull. Acad. Sci. USSR Ser. 26 (1962) 1432
- [40] P. Sigmund und S. Tougaard, Inelastic Particle-Surface Collisions, Ed.: E. Taglauer und W. Heiland (Springer Series in Chemical Physics 17, Berlin, 1981)
- [41] K. Sera, K. Ishii, M. Kamiya, A. Kuwako und S. Morita, Phys. Rev. A21 (1980) 1412
- [42] K. Sera, K. Ishii, A. Yamadera, A. Kuwako, M. Kamiya, M. Sebata, S. Morita und T.C. Chu, Phys. Rev. 22 (1980) 2536
- [43] F. Bell, Universität München, Private Mitteilung, 1985
- [44] D.R. Bates und G. Griffing, Proc. Phys. Soc. (London) A66 (1953) 961
- [45] C. Zupancic und T. Huus, Phys. Rev. 94 (1954) 205
- [46] C.R. Worthington und S.G. Tomlin, Proc. Phys. Soc. (London) A69 (1956) 401
- [47] H.E. Bishop und J.C. Revière, J. Appl. Phys. 40 (1969) 1740
- [48] G. Ertl und J. Küppers, Low Energy Electrons and Surface Chemistry (Verlag Chemie, Weinheim, 1974)
- [49] W.A. Coghlan und R.E. Clausing, At. Data 5 (1973) 317
- [50] J.D. Jackson, Classical Electrodynamics (Wiley, New York, 1975)
- [51] W. Bambynek, B. Crasemann, R.W. Fink, H.U. Freund, H. Mark, C.D. Swift, R.E. Prince und P.V. Rao, Rev. Mod. Phys. 44 (1972) 716
- [52] C.S. Wang und J. Callaway, Phys. Rev. B15 (1977) 298
- [53] E.H.S. Burhop, J. Phys. Radium 16 (1955) 625
- [54] R.A. Baragiola, Radiation Effects 61 (1982) 47
- [55] T. Koshikawa und R. Shimizu, J. Phys. D: Appl. Phys. 7 (1974) 1303
- [56] J. Harris, Elektronische Eigenschaften von Oberflächen, in: Ferienkurs der KFA Jülich, 1980
- [57] M.P. Seah, Surface Sci. 32 (1972) 703
- [58] S. Tugaard und P. Sigmund, Phys. Rev. B25 (1982) 4452
- [59] V.M. Dwyer und J.A.D. Matthew, Surface Sci. 143 (1984) 57

- [60] M. Schuster und C. Varelas, Nucl. Instr. and Meth. B9 (1985) 145
- [61] L.D. Landau und E.M. Lifschitz, Lehrbuch der theoretischen Physik Bd. V Statistische Physik Teil I (Akademie Verlag, Berlin, 1979) S.82
- [62] N. Bohr, Phys. Rev. 58 (1940) 654
- [63] N. Bohr, Phys. Rev. 59 (1941) 270
- [64] A.S. Dawydow, Quantenmechanik (Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1978) S.389
- [65] C. Varelas und R. Sizmann, Radiation Effects 16 (1972) 211
- [66] C. Varelas und R. Sizmann, Surface Sci. 71 (1978) 51
- [67] C. Varelas, K. Goltz und R. Sizmann, Surface Sci. 80 (1979) 524
- [68] U. Bill, R. Sizmann, C. Varelas und K.E. Rehm, Radiation Effects 27 (1975) 59
- [69] K. Günther, Diplomarbeit, Universität München, 1977
- [70] H.-D. Carstanjen, Dissertation, Universität München, 1973
- [71] W. Graser, Dissertation, Universität München, 1984
- [72] R. Kawai, N. Itoh und Y.H. Ohtsuki, Surface Sci. 114 (1982) 137
- [73] G. Molière, Z. Naturforschung 2a (1947) 133
- [74] M.T. Robinson und I.M. Torrens, Phys. Rev. B9 (1974) 5008
- [75] Chr. Lehmann und G. Leibfried, Z. Phys. 172 (1963) 465
- [76] L.D. Landau und E.M. Lifschitz, Lehrbuch der theoretischen Physik Bd. I Mechanik (Vieweg Verlag, Braunschweig, 1970) S. 58
- [77] M.T. Robinson, ORNL-4556, UC-34 Physics Contract No. W-7405-eng-26, Tables of Classical Scattering Integrals, Oak Ridge, 1970, S. 2
- [78] H. Winter, Universität München, Dissertation
- [79] M. Abramowitz und I.A. Segun, Handbook of Mathematical Functions (Dover Publications, New York, 1968)
- [80] C. Varelas und R. Sizmann, Radiation Effects 25 (1975) 163
- [81] B. Heinemann und J. Hölzl, Z. Naturforschung 27a (1972) 408

- [82] Y.H. Ohtsuki und K. Koyama, Phys. Rev. B20 (1979) 5044
- [83] R.J. Glauber, Phys. Rev. 98 (1955) 1692
- [84] R.H. Wilson, E.F. Skelton und J.L. Katz, Acta Cryst. 21 (1966) 635
- [85] D.P. Jackson, Surface Sci. 43 (1974) 431
- [86] A.U. McRae, Surface Sci. 2 (1964) 522
- [87] G. Rovida, M. Torrini und E. Zanazzi, Chem. Phys. Letters 3 (1969) 201
- [88] J.E. Black, Surface Sci. 105 (1981) 59
- [89] D.E. Knuth, The Art of Computer Programming, Bd. 2 (Addison Wesley, 1969) S.104
- [90] J. Lindhard, V. Nielsen und M. Scharff, Mat.-Fys. Medd. Kgl. Danske Vid. Selsk. 36 Nr. 10 (1968)
- [91] H.H. Andersen und J.F. Ziegler, Hydrogen Stopping Powers and Ranges in All Elements (Pergamon Press, New York, 1977)
- [92] P. Sigmund, in: Radiation Damage Processes in Materials, Ed.: C.M.S. Dupuy, NATO Advanced Study Institutes Series, Series E: Applied Sciences 8, Noordhoff-Leyden, 1975
- [93] W. Graser und C. Varelas, Surface Sci. 147 (1985) 74
- [94] Physical Electronic Industries - PHI, Handbook of Auger Electron Spectroscopy, 1972
- [95] P. Joyes, J. Phys. C5 (1972) 2192
- [96] I.A. Van den Berg, L.K. Verheij und D.G. Armour, Surface Sci. 91 (1980) 218
- [97] C. Benazeth, N. Benazeth und M. Hou, Surface Sci. 151 (1985) L137
- [98] R. Pfandzelter, Diplomarbeit, Universität München, 1985
- [99] C.J. Powell, J.R. Stein, P.B. Needham, Jr. und T.J. Driscoll, Phys. Rev. Lett. 30 (1977) 357
- [100] M. Schuster und C. Varelas, Surface Sci. 134 (1983) 195
- [101] J.H. Barrett, Phys. Rev. B3 (1971) 1527
- [102] J.U. Andersen und J.A. Davies, Nucl. Instr. and Meth. 132 (1976) 179

- [103] J.R. MacDonald, L.C. Feldman, P.J. Silverman, J.A. Davies, K. Griffiths, T.E. Jackman, P.R. Norton und W.N. Unertl, Nucl. Instr. and Meth. 218 (1983) 765
- [104] H.V. Thapliyal und J.M. Blackely, J. Vac. Sci. Technol. 15 (1978) 600
- [105] O.B. Firsov, Sov. Phys. JETP 9 (1959) 1076
- [106] O.S. Oen und M.T. Robinson, Nucl. Instr. and Meth. 132 (1976) 647
- [107] J. Lindhard, M. Scharff und H.E. Schiøtt, Mat.-Fys. Medd. Kgl. Danske Vid. Selsk. 33 Nr. 14 (1963)
- [108] J. Gittus, Irridation Effects in Crystalline Solids (Applied Science Publ., London, 1978)
- [109] H. Ullmaier und W. Schilling, Radiation Damage in Reactor Materials, in: Physics of Modern Materials (IAEA-Publ. SMR 46/105, Wien, 1980) S.301
- [110] D.S. Billington und J.H. Crawford, Radiation Damage in Solids (New Jersey, 1961) S.16 ff.
- [111] H. Ullmaier, in: Physikalische Grundlagen metallischer Werkstoffe, Ferienkurs der KFA Jülich, 1982
- [112] M.T. Robinson, in: Sputtering by Particle Bombardment I, Ed.: R. Behrisch (Springer Topics in Applied Physics 47, Berlin, 1981)
- [113] J. Bohdanský, G.L. Chen, W. Eckstein, J. Roth, B.M.U. Scherzer und R. Behrisch, J. of Nuclear Materials 111/112 (1982) 717
- [114] D.F. Mitchell, P.B. Sewell und M. Cohen, Surface Sci. 69 (1977) 310
- [115] C. Benndorf, B. Egert, C. Nöbl, H. Seidel und F. Thieme, Surface Sci. 92 (1980) 636
- [116] L.H. Germer und A.U. MacRae, J. Appl. Phys. 33 (1962) 2923
- [117] J.W. May und L.H. Germer, Surface Sci. 11 (1968) 443
- [118] W. Heiland und E. Taglauer, J. Vacuum Sci. Technol. 9 (1972) 620
- [119] W. Heiland und E. Taglauer, Surface Sci. 68 (1977) 96
- [120] P.M. Marcus, J.E. Demuth und D.W. Jepsen, Surface Sci. 53 (1975) 501

- [121] J.E. Demuth, J. Colloid Interface Sci. 58 (1977) 184
- [122] L.K. Verheij, J.A. Van den Berg und D.G. Armour, Surface Sci. 84 (1979) 408
- [123] J.F. Van der Veen, R.G. Smeenk, R.M. Tromp und F.W. Saris, Surface Sci. 79 (1979) 212
- [124] R.G. Smeenk und R.M. Saris, Surface Sci. 107 (1981) 429
- [125] J.W.M. Frenken, R.G. Smeenk und J.F. Van der Veen, Surface Sci. 135 (1983) 147
- [126] W. Englert, E. Taglauer und W. Heiland, Surface Sci. 117 (1982) 123
- [127] S. Masuda, M. Nishijima, Y. Sakisaka und M. Onchi, Phys. Rev. B26 (1982) 863
- [128] A.M. Barò und L. Ollè, Surface Sci. 126 (1983) 170
- [129] T. Engel und K.H. Rieder, in: Structural Studies of Surfaces, (Springer Tracts in Modern Physics 91, Berlin, 1982) S.171
- [130] A.M. Barò, G. Binnig, H. Rohrer, Ch. Gerber, E. Stoll, A. Baratoff und F. Salvan, Phys. Rev. Letters 52 (1984) 1304
- [131] M. Schuster und C. Varelas, Nucl. Instr. and Meth. B2 (1984) 299
- [132] H.P. Bonzel und S. Ferrer, Surface Sci. Letters 118 (1982) L263
- [133] T. Engel, K.H. Rieder und I.P. Batra, Surface Sci. 148 (1984) 321
- [134] C. Varelas, H.D. Carstanjen und R. Sizmann, Phys. Letters 77A (1980) 469
- [135] E. Sailer und C. Varelas, Nucl. Instr. and Meth. B2 (1984) 326
- [136] H. Preissler, Diplomarbeit, Universität München, 1985
- [137] W. Graser und C. Varelas, Proc. Europ. Conf. on Nuclear Physics Methods in Materials Research, Ed.: K. Bethge (Vieweg Verlag, Braunschweig, 1980)
- [138] V. Schomaker und D.P. Stevenson, J. Am. Chem. Soc. 63 (1941) 37

Danksagung

All denen, die durch Rat und Tat Anteil am Zustandekommen dieser Arbeit haben, möchte ich meinen Dank aussprechen.

Vor allem danke ich Herrn Prof. Dr. R. Sizmann für die Arbeitsmöglichkeit an seinem Lehrstuhl.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Dr. Dr. habil. C. Varelas für die interessante Themenstellung, die intensive Betreuung und für die vielen ausführlichen Diskussionen, die wesentlich zum Fortschritt dieser Arbeit beitrugen, wie auch für seinen Einsatz zur Förderung meines wissenschaftlichen Werdegangs.

Herrn Dr. W. Graser, Frau R. Schlosser sowie meinen Kollegen H. Winter und E. Sailer danke ich für die stete Diskussionsbereitschaft und die tatkräftige Unterstützung.

Den Mitarbeitern des Leibniz-Rechenzentrums der Bayerischen Akademie der Wissenschaften sei für die Beratung bei Programmierproblemen gedankt.

Herrn Ebenböck und seinen Mitarbeitern bin ich zu Dank verpflichtet für die Ausführung der feinmechanischen Arbeiten.

Herrn Eixenberger und seinen Mitarbeitern danke ich für die elektrotechnischen Arbeiten am Beschleuniger.

Dankbar erwähnt sei auch die sorgfältige Erledigung der Schreibarbeiten durch Frau B. Weidich.

Allen Mitgliedern des Lehrstuhls danke für die gute Zusammenarbeit, vor allem Frau D. Hegenberg, Herrn H. Bradatsch und Herrn W. Stadler.

Lebenslauf

Persönliche Daten

Geburt: 14.06.53 in München
Eltern: Richard Schuster, Ingenieur
Annemarie Schuster, geb. Sporer

Schulausbildung

1960-1964 Volksschule in München
1964-1973 Erasmus-Grasser-Gymnasium in München
08.06.73 Abitur

Wehrdienst

1973-1975 Zeitsoldat der Bundeswehr

Studium

1975-1981 Studium der Physik an der
Ludwig-Maximilians Universität München
1979-1981 Diplomarbeit am Lehrstuhl von
Prof. Dr. R. Sizmann mit dem Thema:
Oberflächenanalyse mit ioneninduzierter
Augerelektronenspektroskopie
01.10.81 Diplom

Beruf

01.11.81-31.10.85 wissenschaftlicher Angestellter der
Sektion Physik der Universität München,
Lehrstuhl Prof. Dr. R. Sizmann;
Während dieser Zeit Anfertigung
der Dissertation
seit 06.06.83 Strahlenschutzbeauftragter
seit 01.11.85 Angestellter der Siemens AG im
Forschungslaboratorium München-Perlach

